Instrumento AB SCIEX Triple Quad™ 3500

Guia do Usuário do Sistema

RUO-IDV-05-1418-PT-A

Junho de 2014

Apenas para uso em pesquisa. Não destinado ao uso em procedimentos diagnósticos.

AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, #04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus. Estate.
SINGAPURA 739256

Conteúdo

Precauções e Limitações Operacionais 1

Nota: Antes de operar o sistema, leia com atenção todas as seções deste guia.

Esta seção contém informações gerais relacionadas à segurança e fornece informações sobre conformidade regulatória. Também descreve os riscos potenciais e avisos associados para o sistema e as precauções que devem ser tomadas para minimizar os riscos.

Além desta seção, consulte o *Símbolos de Risco na página 16*para obter informações sobre os símbolos e convenções utilizados em ambiente de laboratório, no sistema e nesta documentação. Consulte o *Guia de Planejamento do Local* para os requisitos do local, incluindo requisitos para fonte de alimentação AC, exaustão da fonte, exaustão, ar, nitrogênio e bomba de vácuo mecânica.

Informações Gerais de Segurança

Para prevenir a lesão pessoal ou dano ao sistema, leia, entenda e obedeça todas as precauções de segurança, avisos neste documento e rótulos do espectrômetro de massas. Estes rótulos são mostrados com os símbolos internacionalmente reconhecidos. A falha em estar atento a estes avisos pode resultar em lesão séria.

Esta informação de segurança tem a intenção de complementar as regulamentações de saúde e segurança ambientais (EHS) federal, estadual, comum e local. A informação fornecida sobre a segurança relacionada com o sistema com relação à operação do espectrômetro de massas. Ela não cobre cada procedimento de segurança que deve ser praticado. Por fim, o usuário e a organização são responsáveis pela aderência às regulamentações EHS federal, estadual, comum e local e por manter o ambiente de laboratório seguro.

Para mais informações, consulte o material de referência laboratorial apropriado e os procedimentos de operação padrão.

Conformidade Regulatória

Austrália e Nova Zelândia

O sistema está em conformidade com as seguintes regulamentações e padrões na Austrália e Nova Zelândia. Rótulos aplicáveis foram fixados ao sistema.

- Compatibilidade Eletromagnética (EMC) - Comunicações de Rádio Ato 1992 conforme implementado nos padrões:
    - AS/NZS CISPR 11:2004 (Classe A)
    - EN 55011:2007 + Am2:2007
    - CISPR 11:2003 + Am1:2004 + Am2:2006
- Safety—AS/NZ 61010-1

Para mais informações, consulte a Declaração de Conformidade inclusa com o sistema e componentes individuais do sistema.

Canadá

O sistema está em conformidade com as seguintes regulamentações e padrões canadenses. Rótulos aplicáveis foram fixados ao sistema.

- Compatibilidade Eletromagnética (Electromagnetic Compatibility) (EMC) — CAN/CSAA CISPR11. Este dispositivo ISM está em conformidade com ICES-001 canadense.
- Regulamentações de Segurança Elétricas Municipais - Electricity Act 1998, Product Safety, Ontario
- Padrões de segurança - CAN/CSA C22.2 No. 61010-1, e CAN/CSA C22.2 No 61010-2-061

Para mais informações, consulte a Declaração de Conformidade inclusa com o sistema e componentes individuais do sistema.

Europa

Este sistema está em conformidade com as seguintes normas e padrões europeus. Rótulos aplicáveis foram fixados ao sistema.

- Diretiva 2004/108/CE sobre Compatibilidade Eletromagnética (EMC) conforme implementado nos padrões:
  - EN61326-1:2006 e IEC 61326-1:2005
  - EN 55011:2009, CISPR 11:2009
  - EN 61000-3-2:2006 + Am2:2009, IEC 61000-3-2:2005 + Am2:2009
  - IEC 61000-3-3:2008
- Diretiva 2012/96/EEC sobre Descarte de Equipamentos Elétricos e Eletrônicos
- Diretivas 2006/95/CE sobre Baixa Voltagem (Low Voltage) conforme implementado nos padrões:
  - EN 61010-1
  - EN 61010-2-061

Para mais informações, consulte a Declaração de Conformidade inclusa com o sistema e componentes individuais do sistema.

Estados Unidos

Este sistema está em conformidade com as seguintes regulamentações e padrões dos Estados Unidos (EUA). Rótulos aplicáveis foram fixados ao sistema.

- Regulamentações para Interferência de Emissões de Rádio (Radio Emissions Interference Regulations)—47 CFR 15 conforme implementada neste padrão: - FCC Parte 15 (Classe A)
- Regulamentações para Segurança e Saúde Ocupacional (Occupational Safety and Health Regulations) — 29 CFR 1910 conforme implementada neste padrão UL 61010-1-04, IEC 61010-2-061, IEC 61010-2-101

Para mais informações, consulte a Declaração de Conformidade inclusa com o sistema e componentes individuais do sistema.

Internacional

Este s sistema está em conformidade com as seguintes regulamentações e padrões. Rótulos aplicáveis foram fixados ao sistema.

- Diretiva 2004/108/CE sobre Compatibilidade Eletromagnética (EMC) conforme implementado nos padrões:
  - IEC 61326-1
  - IEC CISPR 11 (Classe A)
  - EN 55011
  - IEC 61000-3-2
  - IEC 61000-3-3
- Padrões de segurança — UL 61010-1, IEC 61010-2-061, IEC 61010-2-101

Para mais informações, consulte a Declaração de Conformidade inclusa com o sistema e componentes individuais do sistema.

Precauções elétricas

Fontes de Alimentação AC

ADVERTÊNCIA! Risco de Choque Elétrico: Use somente equipe qualificada para a instalação de fornecimentos e fixações elétricas e certifique-se que todas as instalações cumprem com as regulamentações locais e padrões de segurança.

Um transformador externo não é necessário para o espectrômetro de massas, a bancada opcional ou bomba de vácuo mecânica.

CUIDADO: Danos potenciais ao sistema: não desembale o espectrômetro de massas ou as caixas do computador. O FSE irá desembalar e mover o espectrômetro de massas no momento da instalação.

Para informações sobre especificações do sistema elétrico, consulte o *Guia de Planejamento do Local*.

Condutor de Proteção

A alimentação elétrica deve incluir um condutor terra de proteção corretamente instalado. O condutor terra de proteção deve ser instalado ou verificado por um eletricista qualificado antes do espectrômetro de massas ser conectado. Tenha certeza de que o conector da alimentação elétrica está acessível, de forma que o dispositivo não possa ser desconectado.

ADVERTÊNCIA! Risco de Choque Elétrico: Não interrompa de forma intencional o condutor terra de proteção. Qualquer interrupção do condutor terra de proteção provavelmente tornará a instalação perigosa.

Precauções Químicas

- Determine quais produtos químicos foram usados no sistema antes do serviço e manutenção regular. Consulte as Folhas de Dados de Segurança das precauções de saúde e segurança que devem ser acompanhadas com os produtos químicos.
- Trabalhe em uma área bem ventilada.
- Sempre utilize o equipamento de proteção individual designado, incluindo luvas de neoprene sem talco, óculos de segurança e um jaleco.
- Siga as práticas de trabalho elétrico seguro necessárias.
- Evite fontes de ignição quando trabalhar com materiais inflamáveis, como isopropanol, metanol e outros solventes inflamáveis.
- Tome cuidado no uso e descarte de quaisquer produtos químicos. Risco potencial de lesão pessoal se os procedimentos adequados para o manuseio e descarte de produtos químicos não forem seguidos.
- Evite contato da pele com produtos químicos durante a limpeza e lave as mãos após o uso.
- Cumpra com todas as regulamentações locais para o armazenamento, manuseio e descarte de materiais de risco biológico, tóxico ou radioativo.

Fluídos Seguros para o Sistema

Os seguintes fluidos podem ser usados seguramente com o sistema. Consulte o *Informações sobre Serviço e Manutenção na página 128* para informações sobre soluções de limpeza seguras.

CUIDADO: Danos potenciais ao sistema: não utilize nenhum outro fluido até que seja recebida a confirmação da AB SCIEX de que o mesmo não apresenta risco. Esta não é uma lista exaustiva.

- **Solventes Orgânicos**
  - Acetonitrila grau MS; até 100%
  - Metanol grau MS; até 100%
  - Isopropanol; até 100%
  - Água grau HPLC ou superior, até 100%
- **Tampões**
  - Acetato de Amônio; menos do que 1%
  - Formiato de Amônio; menos do que 1%

- **Ácidos e Bases**
  - Ácido Fórmico; menos do que 1%
  - Ácido Acético; menos do que 1%
  - Ácido Trifluoroacético; (TFA) a menos do que 1%
  - Ácido Heptafluorobutírico; (HFBA) menos do que 1%
  - Hidróxido de Amônio/Amônia; menos do que 1%

Precauções de Exaustão

A exaustão de vapores e descarte de resíduos deve estar em conformidade com todas as regulamentações de saúde e segurança federal, estadual, comum e local. Use o sistema dentro de um laboratório que está em conformidade com as condições ambientais recomendadas no *Guia de Planejamento do Local* para o sistema.

O sistema de exaustão da fonte de íons do espectrômetro de massas e a bomba de vácuo mecânica deve ser ventilado para uma coifa de vapores externa ou um sistema de exaustão externo, conforme recomendado no *Guia de Planejamento do Local*.

ADVERTÊNCIA! Risco de Produto Químico Tóxico ou Risco Biológico: Tome cuidado para ventilar gases de exaustão corretamente e certifique-se de que o tubo de exaustão está preso com grampos. O uso de espectrômetros de massa sem exaustão adequada para o ar exterior pode constituir um risco à saúde. Sob essas condições, a exaustão inadequada pode resultar em ferimentos graves.

ADVERTÊNCIA! Risco de Radiação, Risco Biológico, Produto Químico Tóxico: Certifique-se de que o espectrômetro de massas está conectado ao sistema de exaustão local e equipado com dutos para controlar emissões perigosas. O sistema deve ser usado somente em um ambiente de laboratório bem ventilado, em conformidade com os regulamentos locais e com a troca de ar adequada para o trabalho realizado. Algumas jurisdições recomendam de 4 a 12 mudanças no ar por hora nos laboratórios.

ADVERTÊNCIA! Risco de Radiação, Risco Biológico, Produto Químico Tóxico: Não opere o espectrômetro de massas se a drenagem do exaustor fonte e as mangueiras de exaustão da bomba de vácuo mecânica não estiverem devidamente conectadas ao sistema de exaustão laboratorial. Certos procedimentos necessários durante a operação do espectrômetro de massas podem provocar que gases sejam descarregados no fluxo de exaustão. Realize uma verificação regular do tubo de exaustão para certificar que não há vazamentos.

ADVERTÊNCIA! Risco de Radiação, Risco Biológico, Produto Químico Tóxico: Use a fonte de íons somente se você tiver o conhecimento e o treinamento para o uso adequado, retenção e evacuação de materiais prejudiciais ou tóxicos usados com a fonte de íons. Interrompa o uso da fonte de íons se a janela da fonte de íons estiver rachada ou quebrada e entre em contato com um Engenheiro de Serviço (FSE) da AB Sciex. Quaisquer materiais prejudiciais ou tóxicos introduzidos no equipamento estarão presentes na fonte de íons e no produto de exaustão. Descarte os materiais cortantes seguindo os procedimentos de segurança laboratoriais adequados.

Precauções Ambientais

Use pessoal qualificado para a instalação de rede elétrica, aquecimento, sistema de exaustão e tubulações. Certifique-se de que todas as instalações estão em conformidade com estatutos e regulamentos locais de risco biológico. Para mais informações sobre as condições ambientais necessárias para o sistema, consulte o *Guia de Planejamento do Local*.

PERIGO! Risco de Explosão: Não opere o sistema em um ambiente contendo gases explosivos. O sistema não se destina à operação em um ambiente explosivo.

ADVERTÊNCIA! Risco Biológico: Para uso de materiais com risco biológico, sempre cumpra com as regulamentações locais para avaliação de risco, controle e manuseio. Este espectrômetro de massas ou qualquer parte dele não tem por objetivo operar como um armário de segurança de retenção biológica.

CUIDADO: Deslocamento de Massas Potencial: mantenha uma temperatura ambiente estável. Se as mudanças de temperatura forem maiores que 2 °C, então a resolução e a calibração de massa serão afetadas.

Ambiente Eletromagnético

CUIDADO: Resultado errado potencial: não utilize este dispositivo na proximidade de fontes de radiação eletromagnética (EMC) forte (por exemplo, fontes de RF intencionais não protegidas), uma vez que a radiação EMC pode interferir no funcionamento adequado e causar um resultado errado.

Tenha certeza de que um ambiente eletromagnético compatível com o equipamento pode ser mantido de forma que o dispositivo funcionará conforme o desejado.

Em um ambiente doméstico, o dispositivo pode causar interferência nas ondas de rádio. Se isto ocorrer, o usuário pode precisar realizar medidas para mitigar a interferência. Avalie o ambiente eletromagnético antes de operar o dispositivo.

Mudanças ou modificações não expressamente aprovadas pelo fabricante podem anular sua autoridade em operar o equipamento.

Europa

Este equipamento está em conformidade com as exigências de emissão e imunidade descritas no IEC 61326-2-6. Este equipamento foi designado e testado pelo CISPR 11 Classe A e EN 55011 Classe A.

Estados Unidos

Este equipamento foi testado e encontrado em conformidade com os limites para um dispositivo digital de Classe A, de acordo com a Parte 15 das Regras de Conformidade da FCC (Comissão Federal de Comunicações).

Estes limites são designados para fornecer a proteção razoável contra interferência danosa quando o equipamento é operado em um ambiente comercial. Este equipamento gera, usa e pode irradiar energia de frequência de rádio e, se não instalado e usado em conformidade com este guia, pode causar interferência danosa às comunicações por ondas de rádio.

Desativação e Descarte (Descarte de Equipamentos Elétricos e Eletrônicos)

Descontamine o sistema antes da desativação, seguindo as normas locais. Siga o processo Etiqueta Vermelha da AB SCIEX e complete Formulário de Descontaminação do instrumento para devolução do instrumento.

Ao remover o sistema do serviço, separe e recicle diferentes materiais de acordo com as normas ambientais locais e nacionais. Consulte *Armazenamento e Manuseio na página 135*.

Não descarte os componentes do sistema ou subconjuntos, incluindo peças de computador, como lixo comum não separado. Siga os regulamentos de lixo comum local para descarte adequado de resíduo para reduzir o impacto ambiental do WEEE (Descarte de Equipamentos Elétricos e Eletrônicos). Para descarte seguro deste equipamento, entre em contato com um escritório de Atendimento ao Cliente local para coleta e reciclagem gratuita de equipamentos.

Nota: A AB SCIEX não aceitará que nenhum sistema retorne sem um Formulário Descontaminação preenchido.

Pessoa Qualificada

Apenas pessoas qualificadas pela AB SCIEX devem instalar e realizar a manutenção do equipamento. Após instalar o sistema, o Engenheiro de Serviço (FSE) utiliza a *Customer Familiarization Checklist* (Lista de Verificação da Familiarização do Cliente) para orientar o consumidor sobre a operação, limpeza e manutenção básica do sistema.

Apenas pessoas qualificadas pelo fabricante devem realizar a manutenção do equipamento. Um designado pelo laboratório pode estar familiarizado com os procedimentos da Pessoa de manutenção Qualificada (QMP) durante a instalação.

Uso e Modificação do Equipamento

Utilize o sistema dentro de um laboratório que esteja conforme as condições ambientais recomendadas no *Guia de Planejamento do Local*.

Se o sistema for utilizado em um ambiente ou de forma não prescrita pelo fabricante, então a proteção fornecida pelo equipamento pode ser comprometida.

A modificação ou operação não autorizada do sistema pode causar lesão pessoal e dano ao equipamento e pode anular a garantia. Dados errados podem ser gerados se o sistema for operado seja acima ou abaixo das condições ambientais recomendadas ou operado com modificações não autorizadas. Entre em contato com um FSE para informações sobre a manutenção do sistema.

ADVERTÊNCIA! Risco de Lesão Pessoal: Use apenas peças recomendadas pela AB SCIEX. O uso de peças não recomendadas pela AB SCIEX ou o uso de peças para qualquer uso diferente do uso pretendido pode colocar o usuário em risco de lesão ou impactar de forma negativa o desempenho do sistema. A proteção fornecida pelo equipamento pode ser comprometida se o equipamento for utilizado de forma não especificada pela AB SCIEX.

Treinamento e Documentação do Consumidor

Visite o web site da AB SCIEX (www.absciex.com/training) para informações sobre o treinamento.

O *Guia de Planejamento do Local* é fornecido ao consumidor antes da instalação. Os guias e tutoriais para o software Analyst® são instalados automaticamente com o software e estão disponíveis a partir do menu Iniciar: **Todos os Programas > AB SCIEX > Analyst**. Os guias para o espectrômetro de massas e a fonte de íons estão disponíveis no *DVD de Referência do Cliente*. Os guias para as fontes de íons estão disponíveis no *CD de Referência do Cliente para a Fonte de Íons*. Uma lista completa da documentação disponível pode ser encontrada na Ajuda. Para visualizar a Ajuda do software **Analyst**, pressione **F1.**

Entre em contato conosco

Suporte da AB SCIEX

- support@absciex.com
- www.absciex.com

Treinamento do Consumidor

- Na América do Norte: NA.CustomerTraining@absciex.com
- Na Europa: Europe.CustomerTraining@absciex.com

Documentação do Consumidor

- techpubs@absciex.com

Símbolos de Risco 2

Esta seção lista os símbolos e convenções de risco utilizados no ambiente laboratorial, no sistema e na documentação.

Símbolos de Saúde e Segurança Ocupacionais

Esta seção descreve alguns símbolos de saúde e segurança ocupacionais encontrados na documentação e ambiente laboratorial.

Tabela 2-1 Símbolos de Risco de Produtos Químicos

Símbolos de Segurança	Definição
	Risco Biológico
	Risco de Explosão
	Risco de Produtos Químicos Tóxicos

Tabela 2-2 Símbolos de Aviso de Risco Elétrico

Símbolos de Segurança	Definição
	Risco de Choque Elétrico

Tabela 2-3 Símbolos de Aviso de Risco com Gás Pressurizado

Símbolos de Segurança	Definição
	Risco de Gás Pressurizado

Tabela 2-4 Símbolos de Risco Mecânicos

Símbolos de Segurança	Definição
	Risco de Superfície Quente
	Risco de Suspensão
	Risco de Perfuração
	Risco de Radiação por Ionização

Símbolos, Indicadores e Rótulos: Embalagem

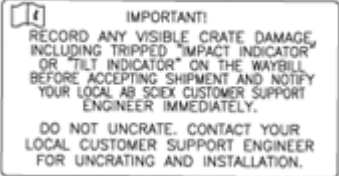
Tabela 2-5 Rótulos nos Materiais de Remessa do espectrômetro de massas

Rótulo/Símbolo	Definição
TILTWATCH PLUS ou TIP N TELL	Indicador de Inclinação Indica se o recipiente foi inclinado ou tratado de forma indevida. Escreva no Conhecimento de Embarque e inspecione quanto a danos. Qualquer queixa de tombamento exige uma observação.

Tabela 2-5 Rótulos nos Materiais de Remessa do espectrômetro de massas (continuação)

Rótulo/Símbolo	Definição
	Mantenha na posição vertical.
ou	Indicador de Impacto Se o indicador for ativado, então, o recipiente foi derrubado ou tratado de outra forma indevida. Tome nota no conhecimento de embarque e verifique quanto a danos.
	IMPORTANTE! REGISTRE QUALQUER DANO VISÍVEL À CAIXA INCLUINDO "INDICADOR DE IMPACTO" ATIVADO OU "INDICADOR DE INCLINAÇÃO" DO DOCUMENTO DE EMBARQUE ANTES DE ACEITAR O ENVIO E NOTIFIQUE SEU ENGENHEIRO DE SUPORTE AO CONSUMIDOR AB SCIEX LOCAL IMEDIATAMENTE. NÃO DESEMBALE. ENTRE EM CONTATO COM SEU ENGENHEIRO DE SUPORTE AO CONSUMIDOR LOCAL PARA DESEMBALAR E INSTALAR.
	Mantenha seco.
	Frágil

Símbolos, Indicadores e Rótulos: espectrômetro de massas

Consulte *Símbolos do Painel na página 23* para mais informações.

Tabela 2-6 Rótulos no espectrômetro de massas

Rótulo	Definição
WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.	ADVERTÊNCIA: Não contém partes utilizáveis pelo usuário. CONSULTE A MANUTENÇÃO PARA PESSOA QUALIFICADA. Consulte as instruções de uso.
	Não descarte o equipamento no lixo comum não seletivo (WEEE).
	AVISO: Risco de Superfície Quente
	Consulte as instruções de uso.
	AVISO: Alta Voltagem. Risco de Choque Elétrico.
	Condutor Terra de proteção (aterramento)
	Corrente Alternada
	Conexão com Ethernet
A	Amperes (corrente)
V	Volts (voltagem)

Tabela 2-6 Rótulos no espectrômetro de massas (continuação)

Rótulo	Definição
VA	Ampère de Voltagem (energia)
WARNING: "DO NOT OPERATE WITHOUT FIRST ENSURING BOTTLE CAP IS SECURED"	ADVERTÊNCIA: Não opere sem se certificar que a tampa do frasco está presa.

Documentação de Símbolos e Convenções

Os seguintes símbolos e convenções são usados ao longo do guia.

PERIGO! Perigo significa uma ação que leva à lesão grave ou morte.

ADVERTÊNCIA! Aviso significa uma ação que pode causar lesão pessoal se as precauções não forem seguidas.

CUIDADO: Cuidado significa uma operação que pode causar dano ao sistema ou corrupção ou perda de dados se as precauções não forem seguidas.

Nota: Observação enfatiza a informação significativa em um procedimento ou descrição.

Dica! Dica fornece informações úteis que ajudam a aplicar técnicas e procedimentos no texto para uma necessidade específica e fornece atalhos, mas não é essencial para a conclusão de um procedimento.

Princípios de Operação 3

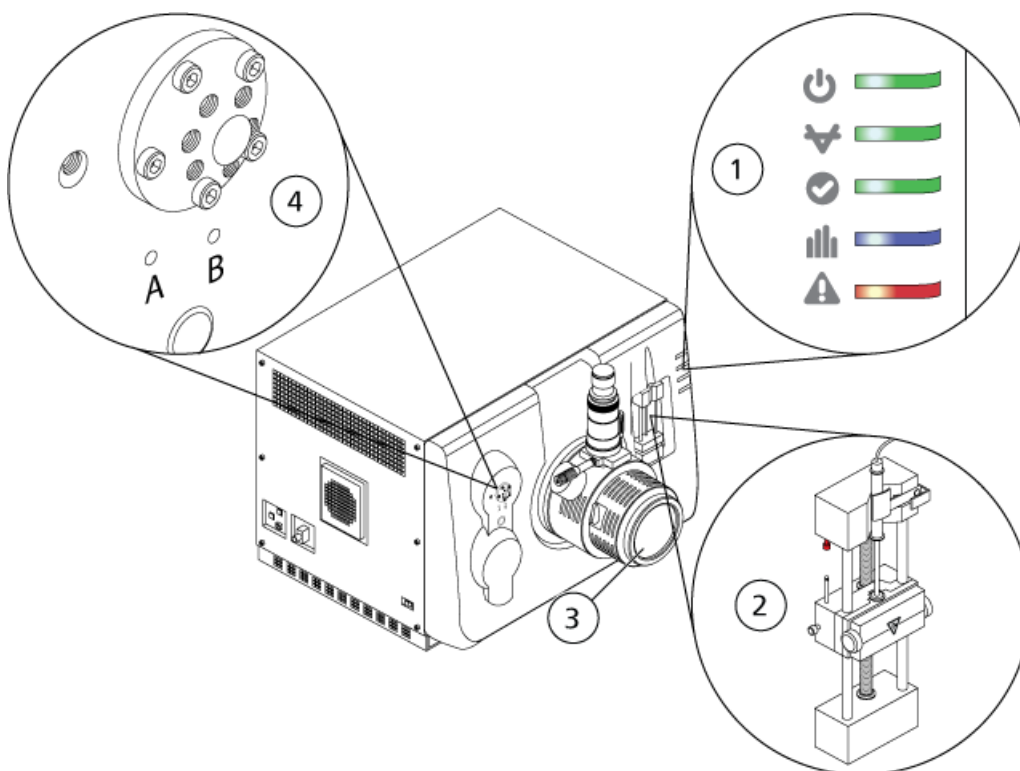
Visão Geral do Sistema

Este sistema é pretendido para a análise qualitativa e quantitativa de espécies químicas.

O sistema inclui os seguintes componentes:

- Um sistema AB SCIEX Triple Quad™ 3500 LC/MS/MS com uma fonte de íons Turbo V™ que usa a sonda TurboIonSpray® ou a sonda de Ionização Química por Pressão Atmosférica, uma bomba de vácuo mecânica e uma fonte de ar comprimido e nitrogênio.
- Um computador e monitor fornecido pela AB SCIEX com o software Analyst® para otimização do instrumento, desenvolvimento do método de aquisição e aquisição e processamento dos dados.

Visão Geral do Hardware

Figura 3-1 Visão Frontal

Item	Descrição	Consulte...
1	Símbolos do Painel	*Símbolos do Painel na página 23*
2	Bomba da seringa	*Ajuste a posição da bomba de seringa integrada na página 29*
3	Fonte de Íons Turbo V	*Guia de Operação da Fonte de Íons*
4	Válvula de 6 portas	*Conecte a Válvula do Injetor no Modo Desvio (descarte) na página 34*

Símbolos do Painel

Tabela 3-1 descreve os LEDs do status do Espectrômetro de massas.

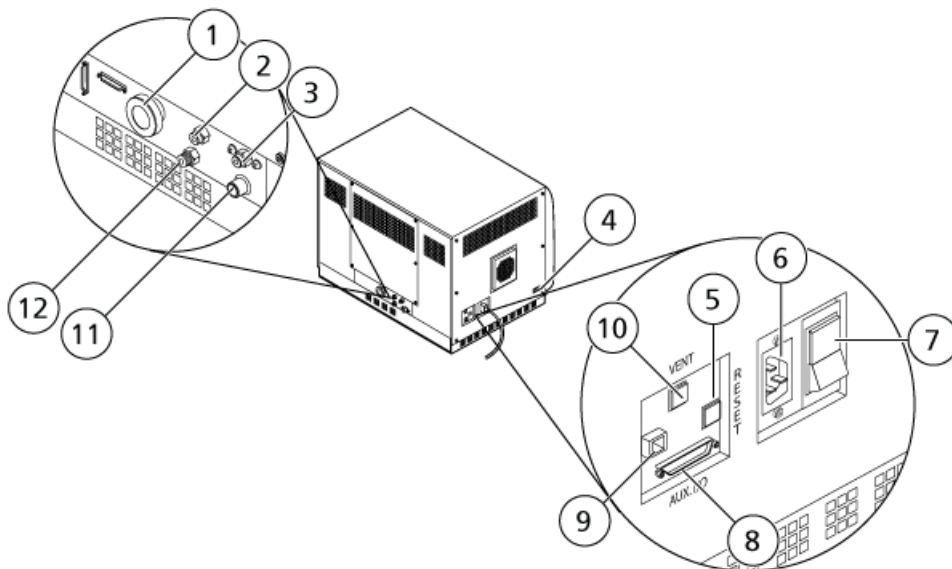
Tabela 3-1 Símbolos do Painel

LED	Cor	Nome	Descrição
	Verde	Energia	Aceso quando o sistema está ligado.
	Verde	Vácuo	Aceso quando o vácuo correto foi atingido. Piscando se o vácuo não for o vácuo correto (durante o bombeamento e exaustão).
	Verde	Pronto	Acesa quando o sistema está no estado Pronto. O sistema deve estar no estado Pronto para operar.
	Azul	Scanning	Piscando quando o sistema está adquirindo dados.
	Vermelho	Falha	Aceso quando o sistema encontra uma falha no sistema.

Após o sistema ter sido ligado, todas os LEDs se iluminam. O LED de energia permanece aceso. Os outros quatro LEDs piscam durante dois segundos e então desligam. O LED do vácuo começa a piscar. Após atingir o vácuo correto, este LED permanece aceso.

Conexões

A *Figura 3-2* mostra a localização das conexões de espectrômetro de massas, incluindo as localizações dos botões **RESET (REDEFINIR)** e **VENT (EXAUSTÃO)** e o interruptor de conveniência do espectrômetro de massas.

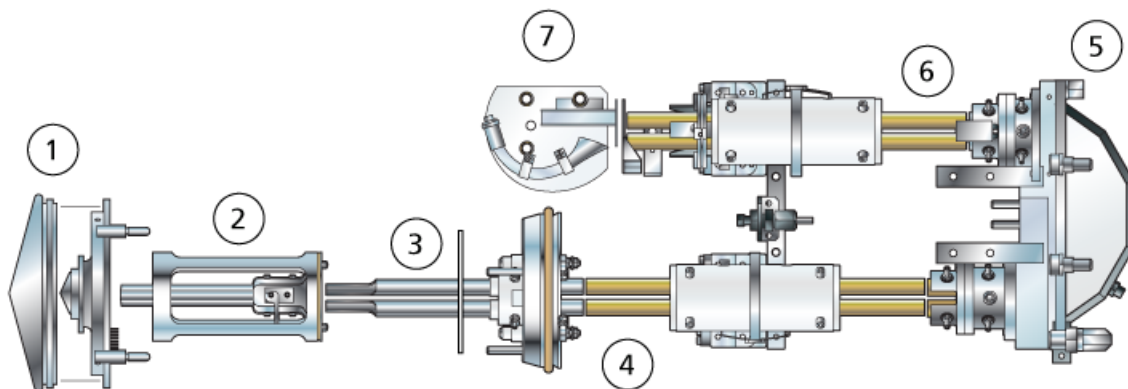
Figura 3-2 Visualizações Posterior e Lateral

Item	Descrição	Para mais informações...
1	Conexão do vácuo da bomba de vácuo mecânica	Entre em contato com um FSE.
2	Fornecimento de gás nitrogênio (fornecimento de Curtain Gas™; gás CAD)	Entre em contato com um FSE.
3	Fornecimento do exaustor fonte	Entre em contato com um FSE.
4	Conexão de comunicação da fonte	Entre em contato com um FSE.
5	botão **RESET (REDEFINIR)**	Consulte *Reiniciar o espectrômetro de massas na página 28*.
6	Conexão de alimentação elétrica	Consulte *Inicie o Sistema na página 27* ou *Desligar o Sistema na página 28*.
7	Comutador de conveniência do espectrômetro de massas (Para cima = Ligado; Para baixo = Desligado)	Consulte *Inicie o Sistema na página 27* ou *Desligar o Sistema na página 28*.
8	Conexão AUX I/O	Consulte o *Guia de Configuração para Dispositivos Periféricos*.
9	Conexão com Ethernet (conecta o espectrômetro de massas e computador)	Entre em contato com um FSE.

Item	Descrição	Para mais informações...
10	botão **VENT (EXAUSTÃO)**	Consulte *Inicie o Sistema na página 27* ou *Desligar o Sistema na página 28*.
11	Descarte do exaustor fonte (para o frasco de descarte)	Entre em contato com um FSE.
12	Fornecimento de ar (Gás 1/Gás 2)	Entre em contato com um FSE.

Teoria de Operação

A espectrometria de massa mede a relação massa-carga de íons para identificar compostos desconhecidos, quantificar os compostos conhecidos e fornecer informações sobre as propriedades estruturais e químicas das moléculas.

O espectrômetro de massas tem uma série de quadrupolos que transmitem íons de acordo com sua razão de massa-carga (*m/z*). O primeiro quadrupolo nesta série é o QJet® guia de íons localizada entre a orifice plate e a região do Q0. A guia de íons QJet não filtra os íons, mas concentra-os antes de entrarem na região do Q0. Focando previamente o fluxo de íons maiores criado pelo orifício mais largo, a guia de íons QJet aumenta a sensibilidade do sistema e melhora a razão entre ruído e sinal. Na região de Q0, os íons são focados novamente antes de passarem para o quadrupolo Q1.

Figura 3-3 Caminho Iônico

Item	Descrição
1	Orifice plate
2	Guia de íons QJet
3	Região de Q0
4	Quadrupolo Q1

Item	Descrição
5	Célula de colisão Q2
6	Quadrupolo Q3
7	Detector

O quadrupolo Q1 é um quadrupolo de filtragem que classifica os íons antes de entrarem na célula de colisão Q2. A célula de colisão Q2 é onde a energia interna de um íon é aumentada por meio de colisões com as moléculas de gás, a ponto que as ligações moleculares quebram criando íons produtos. Esta técnica permite aos usuários projetar experimentos que medem a *m/z* dos íons produto para determinar a composição dos íons de origem.

Depois de passar pela célula de colisão Q2, os íons entram no quadrupolo Q3 para filtragem adicional e, em seguida, entram no detector. No detector, os íons criam um fluxo que é convertido em uma pulsação de voltagem. As pulsações de voltagem que saem do detector são diretamente proporcionais à quantidade de íons que entram no detector. O sistema monitora essas pulsações de voltagem e converte as informações em um sinal. O sinal representa a intensidade dos íons para um valor *m/z* particular e o sistema mostra esta informação como um espectro de massa.

Manuseio de Dados

O software Analyst® precisa de um computador com o sistema operacional Windows. O computador com o software de sistema associado funciona com o controlador do sistema e o firmware associado ao controle de sistema e aquisição de dados. Durante a operação do sistema, o dado adquirido é enviado para o software Analyst no qual ele pode ser exibido como espectro de massa completo, intensidade de um íon ou vários íons em relação ao tempo, ou corrente iônica total em relação ao tempo.

Instruções de Operação - Hardware 4

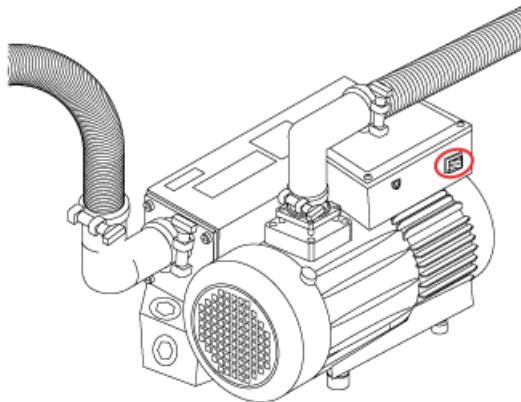
Inicie o Sistema

ADVERTÊNCIA! Risco de Suspensão: Não mova o sistema. Risco de lesão pessoal ou dano ao sistema. Se o sistema deve ser movido, então, entre em contato com um Engenheiro de Serviço (FSE).

Nota: Antes de iniciar o sistema, leia as *Precauções e Limitações Operacionais na página 7*.

Antes do sistema ser ligado, tenha certeza que os requerimentos no local especificados no *Guia de Planejamento do Local* foram atingidos. O *Guia de Planejamento do Local* inclui informações sobre a alimentação da energia e conexões, exaustor da fonte de íons, ar comprimido, nitrogênio, bomba de vácuo mecânica, exaustão e o espaço do local.

1. Tenha certeza de que exista acesso limpo ao conector da alimentação elétrica. O conector deve ser acessível para desconectar o espectrômetro de massas da alimentação elétrica.
2. Tenha certeza de que o gás de escape da fonte de íons, gases do ar comprimido e nitrogênio estejam conectados ao espectrômetro de massas.
3. Tenha certeza de que o frasco do dreno de 4L esteja conectado à conexão de resíduos do exaustor na parte de trás do espectrômetro de massas e ao sistema de exaustão do laboratório.
4. Tenha certeza de que as mangueiras do exaustor fonte estão fixadas com segurança ao espectrômetro de massas, frasco do dreno e conexões da exaustão.
5. Tenha certeza de que o botão de conveniência está desligado e que o cabo da alimentação elétrica está ligado no espectrômetro de massas.
6. Tenha certeza de que os cabos de alimentação elétrica do espectrômetro de massas e a bomba de vácuo mecânica estão ligados na alimentação elétrica AC de 200 VAC a 240 VAC.
7. Tenha certeza de que o cabo Ethernet está ligado em ambos espectrômetro de massas e computador.
8. Ligue a bomba de vácuo mecânica. O botão Liga/Desliga está localizado ao lado da conexão de entrada de alimentação elétrica na bomba de vácuo mecânica.

Figura 4-1 Bomba de vácuo mecânica - Botão de Liga/Desliga

9. Aguarde cinco minutos e depois ligue o botão de conveniência do espectrômetro de massas.
10. Ligue o computador.

Reiniciar o espectrômetro de massas

1. Interrompa quaisquer varreduras em andamento e desligue o fluxo da amostra no espectrômetro de massas.
2. No software Analyst® , desative o perfil do hardware, se estiver ativo.
3. Aperte e mantenha pressionado o botão **Reset** (Redefinir) durante cinco segundos.

   Um clique é ouvido quando as atividades são retransmitidas. Após aproximadamente três minutos, o espectrômetro de massas deve atingir a pressão de operação.

Desligar o Sistema

Dica! Se o espectrômetro de massas não for usado por um intervalo de tempo, recomendamos que ele seja mantido em standby com a fonte de íons no local. Se o espectrômetro de massas precisar ser desligado, siga estas instruções. Não desligue a bomba de vácuo mecânica até que as bombas turbo tenham parado de girar.

1. Complete ou interrompa quaisquer varreduras em andamento.
2. Desligue o fluxo de amostra do sistema.

   CUIDADO: Danos potenciais ao sistema: desligue o fluxo da amostra antes do sistema ser desligado.

3. No software Analyst® , desative o perfil do hardware, se estiver ativo.

4. Feche o software.
5. Aperte e mantenha pressionado o botão **Vent** durante três segundos.

   A bomba turbo irá reduzir a rotação gradualmente.
6. Aguarde 15 minutos.
7. Desligue a bomba de vácuo mecânica.

   O botão Liga/Desliga está localizado ao lado da conexão de entrada de alimentação elétrica na bomba de vácuo mecânica.
8. Aguarde 15 minutos, então desligue o espectrômetro de massas no botão de comodidade.
9. Desconecte o cabo de alimentação elétrica AC do fornecedor de energia ou conector do condutor da entrada aplicável e desconecte o fornecimento elétrico do espectrômetro de massas.
10. Desconecte o cabo de alimentação elétrica AC da bomba de vácuo mecânica da saída de alimentação elétrica.

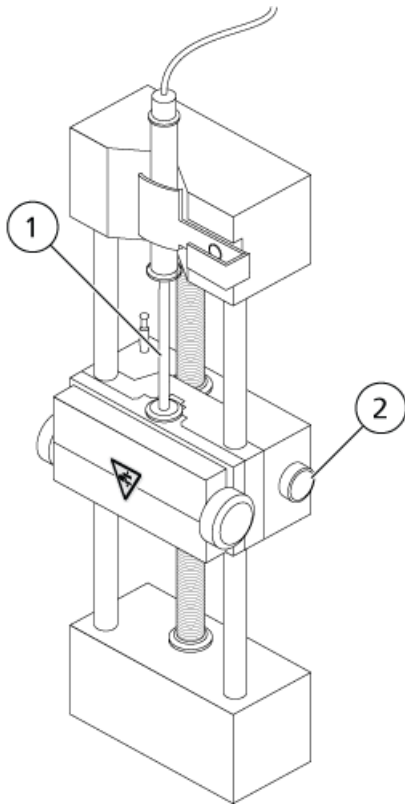
Conecte o espectrômetro de massas

ADVERTÊNCIA! Riscos de Lesão Pessoal: Certifique-se de que a seringa está localizada corretamente na bomba de seringa e que a parada da bomba de seringa automática é ajustada corretamente para evitar danificar ou quebrar a seringa de vidro.

Ajuste a posição da bomba de seringa integrada

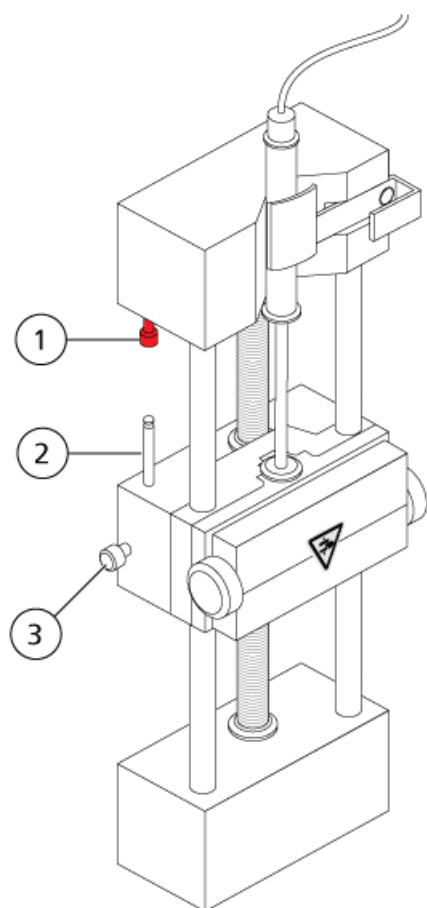
ADVERTÊNCIA! Risco de Perfuração: Tome cuidado quando inserir a seringa. A ponta da seringa é extremamente afiada.

1. Pressione o botão **Release (Liberar)** no lado direito da bomba de seringa para reduzir a base e, em seguida, insira a seringa. Consulte *Figura 4-2*.
2. Certifique-se de que a extremidade da seringa está posicionada em direção à base e que o eixo da seringa encosta no comutador.

Figura 4-2 Abaixando a Seringa

Item	Descrição
1	Êmbolo da Seringa
2	Botão de liberação. Pressione-o para suspender ou diminuir a base.

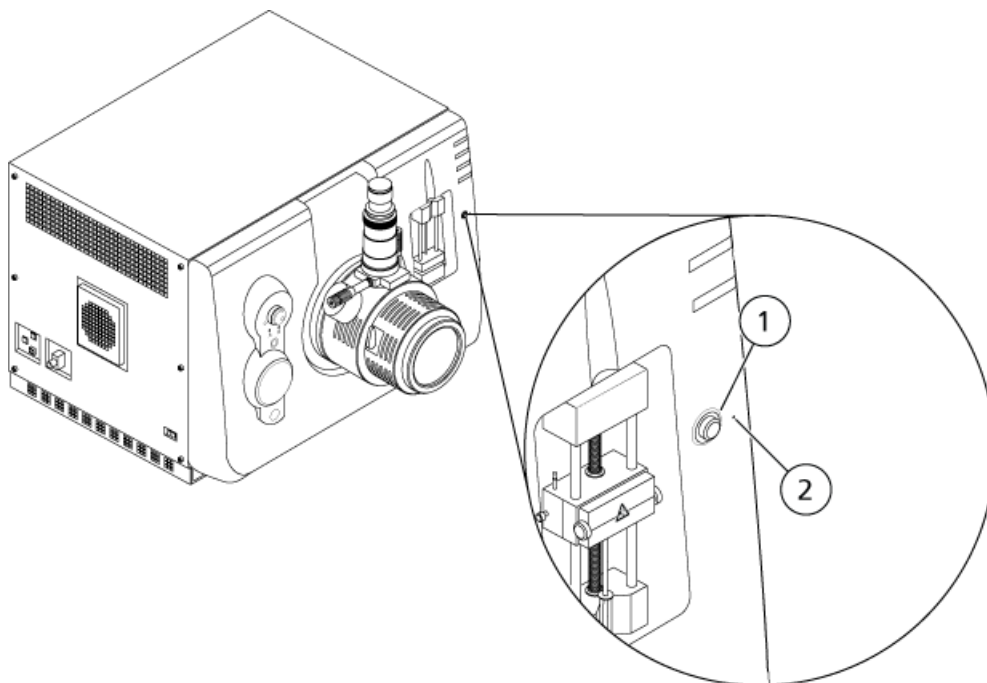
ADVERTÊNCIA! Riscos de Lesão Pessoal: Certifique-se de que a seringa está localizada corretamente na bomba de seringa e que a parada da bomba de seringa automática é ajustada corretamente para evitar danificar ou quebrar a seringa de vidro.

3. Ajuste a coluna de modo que desencadeie a interrupção automática da seringa antes de o êmbolo da seringa atingir a parte inferior da seringa de vidro. Consulte a *Figura 4-3*.

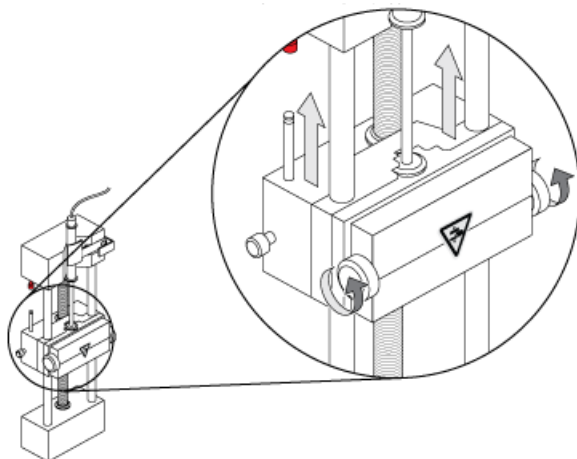
Figura 4-3 Interrupção Automática da Seringa

Item	Descrição
1	Interrupção automática da seringa Depois que a coluna atinge a interrupção automática da seringa, a bomba da seringa para.
2	Coluna Ajuste a altura para evitar que o êmbolo da seringa atinja a seringa durante a infusão da amostra.
3	Parafuso de trava da coluna Aperte o parafuso após a altura da coluna ser ajustada.

4. Certifique-se de que o espectrômetro de massas e fonte de íons estão ativadas no software.

Nota: Para uso posterior, no espectrômetro de massas, pressione o botão no lado direito da bomba de seringa para iniciar o fluxo. Consulte *Figura 4-4*. O LED ao lado do botão pisca quando a bomba de seringa está em uso.

Figura 4-4 Bomba da Seringa LED

Item	Descrição
1	Botão para ligar e desligar a bomba de seringa
2	Status da Bomba da Seringa LED

5. Gire os parafusos laterais conforme mostrado na *Figura 4-5* para prender a seringa.

Figura 4-5 Parafusos da Bomba de Seringa

6. No software Analyst®, na barra de navegação, clique duas vezes em **Manual Tuning (Ajuste Manual)**.

7. Clique em **Start Syringe (Iniciar Seringa)**.
8. Para parar a bomba de seringa, clique em **Stop Syringe (Parar Seringa)**.

Conecte a Válvula de 6 Portas no Modo Injetor

A válvula de 6 portas é uma válvula de dupla posição de seis portas. Ela pode ser conectada no modo injetor ou no modo desvio (descarte). Para configurar a válvula, acesse a aba **Configuration (Configuração)** e certifique-se de que a caixa de seleção **Use integrated injector/diverter valve (Utilizar válvula integrada do inversor/injetor)** está marcada. Consulte a *Dispositivos Adicionais para um Perfil de Hardware na página 41*.

CUIDADO: Possível Resultado Incorreto: o botão da válvula de 6 portas está ativo durante uma execução. Pressionar o botão durante uma execução pode resultar em dados incorretos.

Se a válvula estiver colocada na posição A, a amostra flui através do circuito externo. Consulte a *Figura 4-8*. Quando a válvula é comutada para a posição B, a amostra é injetada. Consulte a *Figura 4-9*.

- Conecte a válvula para o modo injetor.

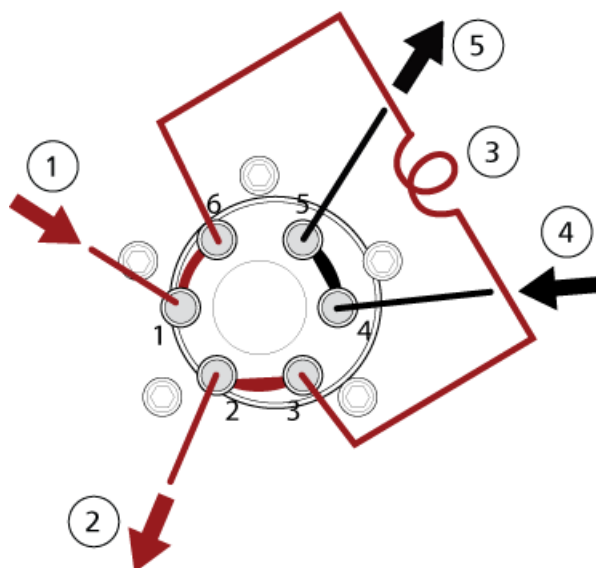
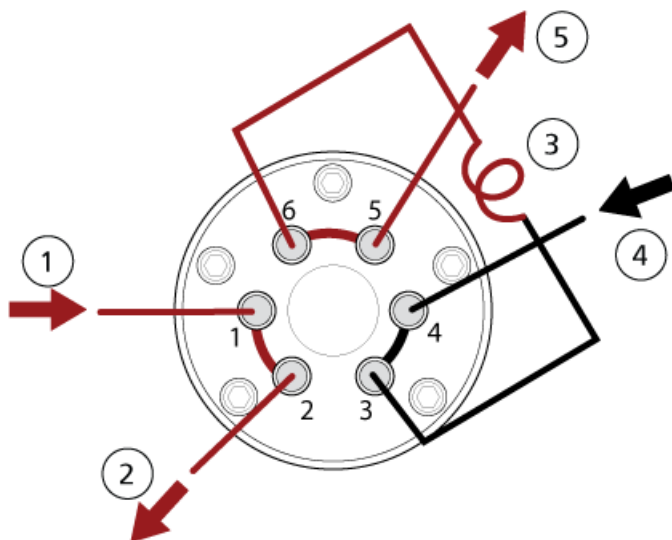
Figura 4-6 Válvula de 6 portas – Modo Injetor Posição A

Item	Descrição
1	Entrada da Amostra
2	Descarte
3	Loop de amostra (portas 3 e 6)
4	Entrada da fase móvel
5	Para a coluna

Figura 4-7 Válvula de 6 portas – Modo Injetor Posição B

Item	Descrição
1	Entrada da Amostra
2	Descarte
3	Loop de amostra
4	Entrada da fase móvel
5	Para a coluna

Conecte a Válvula do Injetor no Modo Desvio (descarte)

A válvula de 6 portas pode ser conectada no modo injetor ou no modo desvio (descarte). Para configurar a válvula, acesse a aba **Configuration (Configuração)** e certifique-se de que a caixa de seleção **Use integrated injector/diverter valve (Utilizar válvula integrada de 6 portas/injetor)** está marcada. Consulte *Dispositivos Adicionais para um Perfil de Hardware na página 41*.

CUIDADO: Possível Resultado Incorreto: o botão da válvula de 6 portas está ativo durante uma execução. Pressionar o botão durante uma execução pode resultar em dados incorretos.

- Conecte a válvula para o modo de desvio. Se a válvula estiver colocada na posição A, a amostra flui através do circuito externo. Consulte *Figura 4-8*. Quando a válvula é comutada para a posição B, a amostra é injetada. Consulte *Figura 4-9*.

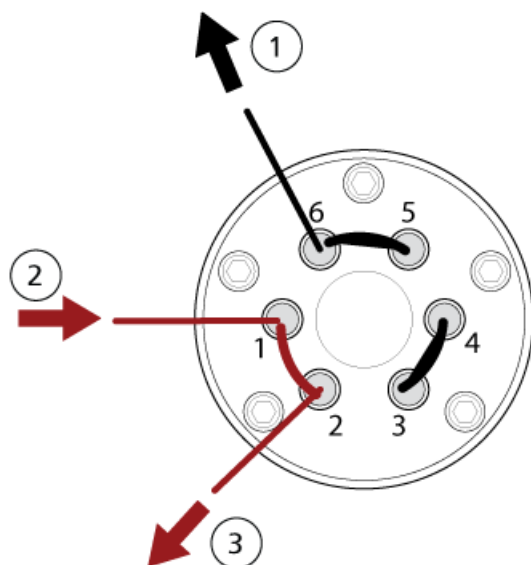
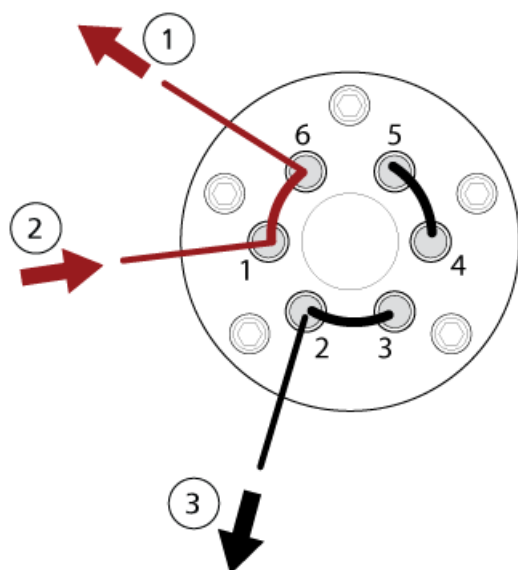
Figura 4-8 Válvula de 6 portas - Modo Desvio Posição A

Item	Descrição
1	Para o espectrômetro de massas
2	Coluna de origem
3	Descarte

Figura 4-9 Válvula de 6 portas - Modo Desvio Posição B

Item	Descrição
1	Para o espectrômetro de massas
2	Coluna de origem
3	Descarte

Instruções de operação – Perfis de hardware e Projetos 5

Perfis de Hardware

Um perfil de hardware informa o software como o espectrômetro de massas e os dispositivos estão configurados e ligados ao computador.

Cada perfil de hardware deve incluir um espectrômetro de massas. Antes de criar um método de aquisição, certifique-se de que todos os dispositivos utilizados no método estão incluídos no perfil de hardware. Nas opções de configuração para o espectrômetro de massas, certifique-se que a bomba de seringa está habilitada se ela for usada durante a aquisição.

Os dispositivos configurados no perfil de hardware ativo e selecionados na caixa de diálogo **Add/Remove Device Method (Adicionar/Remover Método de Dispositivo)** são exibidos como ícones no painel **Acquisition method (Método de Aquisição)**. Apenas os dispositivos incluídos no perfil de hardware ativo podem ser usados para criar métodos de aquisição.

Para obter informações sobre como configurar as conexões físicas dos dispositivos, consulte o *Guia de Instalação de Dispositivos Periféricos*. Para obter uma lista dos dispositivos suportados, consulte o *Guia de Instalação do Software* para o software Analyst® .

Criar um perfil do hardware

O usuário pode criar vários perfis de hardware, mas apenas um perfil pode estar ativo a qualquer momento.

1. Na barra de navegação, abaixo de **Configure (Configurar)**, clique duas vezes em **Hardware Configuration (Configuração de Hardware)** .

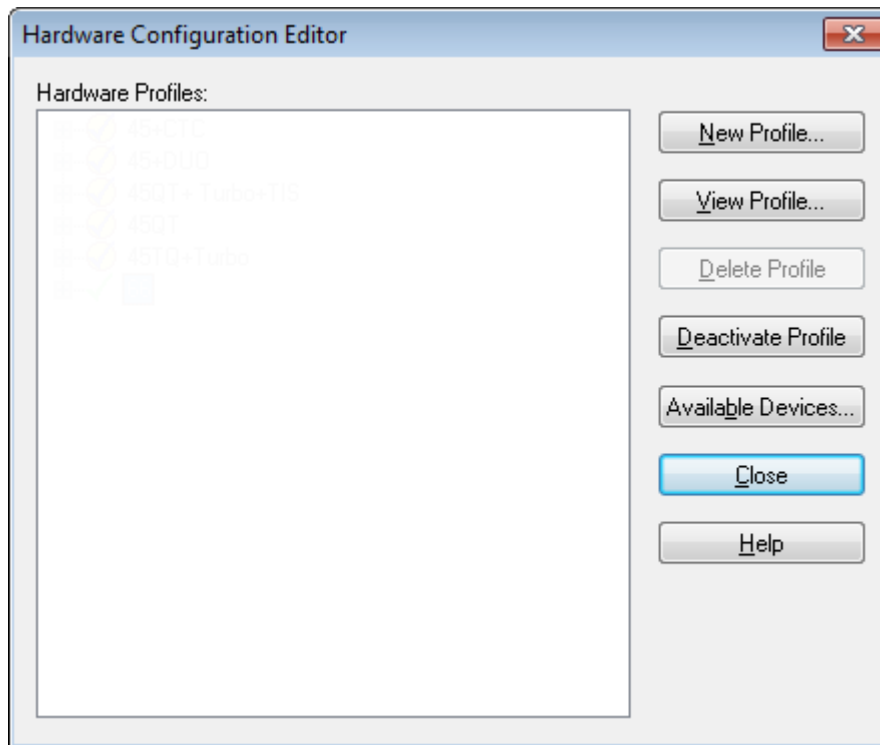
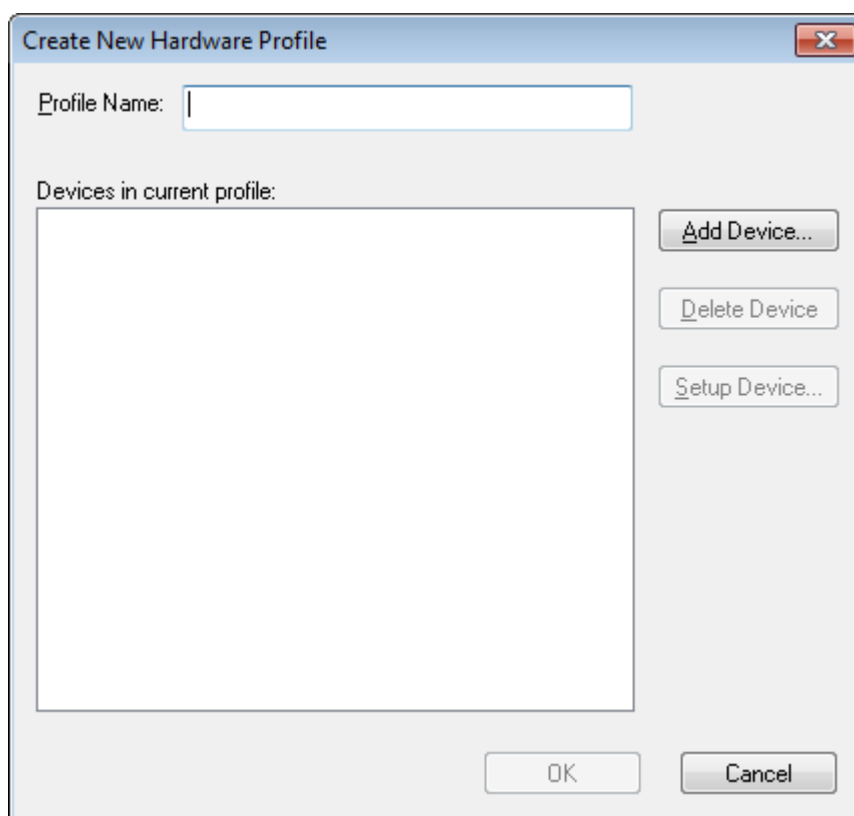
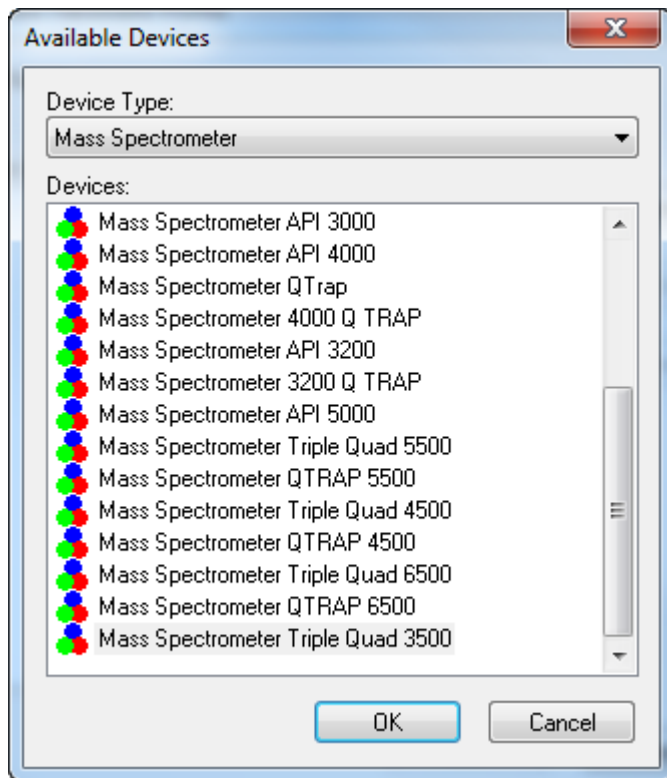
Figura 5-1 Caixa de Diálogo de Configuração do Hardware

2. Clique em **New Profile (Novo Perfil)**

Figura 5-2 Caixa de diálogo Criar Novo Perfil de Hardware

3. Digite um nome no campo **Profile Name (Nome do Perfil)**.
4. Clique em **Add Device (Adicionar Dispositivo)**.

   Na caixa de diálogo **Available Devices (Dispositivos disponíveis)** , no campo**Device Type (Tipo de Dispositivo)**, **Mass Spectrometer (espectrômetro de massas)** está o valor pré-definido.
5. Selecione o espectrômetro de massas a partir da lista **Devices (Dispositivos)**.
6. Clique em **OK**.
7. Selecione o espectrômetro de massas a partir da lista **Devices in current profile (Dispositivos no perfil atual)**.

Figura 5-3 Caixa de diálogo Dispositivos Disponíveis

8. Clique em **Setup Device (Configuração do Dispositivo)**.
9. (Opcional) Para configurar o espectrômetro de massas para a bomba de seringa integrada, na aba **Configuration (Configuração)**, marque a caixa de seleção **Use integrated syringe pump (Utilizar bomba de seringa integrada)**.

ADVERTÊNCIA! Riscos de Lesão Pessoal: Certifique-se de que a seringa está localizada corretamente na bomba de seringa e que a parada da bomba de seringa automática é ajustada corretamente para evitar danificar ou quebrar a seringa de vidro.

10. Selecione funções adicionais nas abas **Configuration (Configuração)** e **Communication (Comunicação)** se necessário.
11. Clique em **OK**para retornar a caixa de diálogo **Create New Hardware Profile (Criar Novo Perfil de Hardware)**.
12. Adicione e configure cada dispositivo que é usado com o espectrômetro de massas.
13. Clique em **OK** na caixa de diálogo **Create New Hardware Profile (Criar Novo Perfil de Hardware)**
14. Clique no perfil de hardware no **Hardware Configuration Editor (Editor de Configuração de Hardware)**.

15. Clique em **Activate Profile (Ativar Perfil)** .

    A marca de seleção torna-se verde. Se um X vermelho aparecer, então, há um problema com a ativação do perfil de hardware.

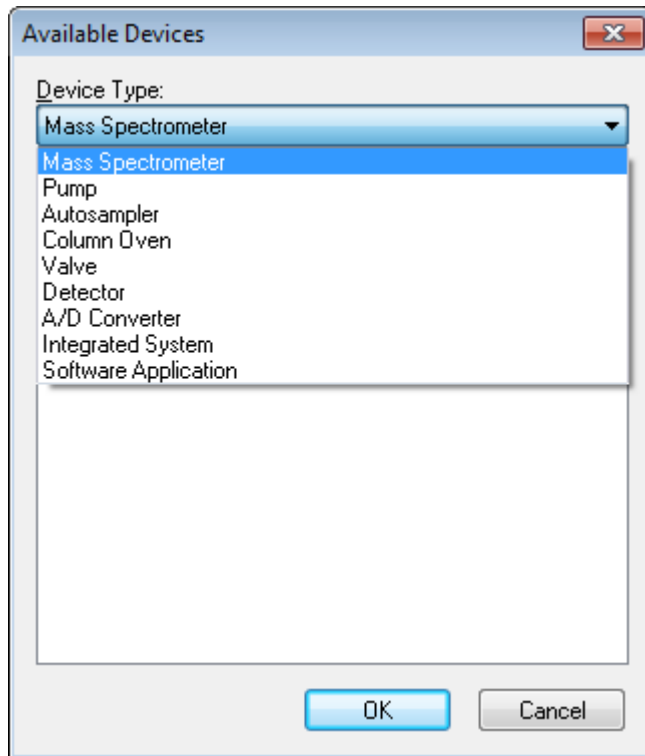
    Dica! Um perfil de hardware não tem que ser desativado antes que outro seja ativado. Clique em um perfil de hardware e, então, clique em **Activate Profile (Ativar Perfil).** O outro perfil será desativado automaticamente.

16. Clique em **Close (Fechar)**.

Dispositivos Adicionais para um Perfil de Hardware

Os dispositivos devem ser configurados para permitir que o software se comunique com eles. Quando o software estiver instalado, o driver necessário para cada dispositivo também é instalado. Depois que os dispositivos estiverem fisicamente conectados ao computador, configure o dispositivo.

1. Abrir o **Hardware Configuration Editor (Editor de Configuração de Hardware)**.
2. Na lista **Hardware Profiles (Perfis de Hardware)**, desative o perfil de hardware.
3. Clique em **Edit Profile (Editar Perfil)**.
4. Clique em **Add Device (Adicionar Dispositivo)**.
5. Na caixa de diálogo **Available Devices (Dispositivos Disponíveis)**, na lista **Device Type (Tipo de Dispositivo)** selecione o dispositivo.

Figura 5-4 Caixa de diálogo Dispositivos Disponíveis

6. Clique em **OK**.
7. Selecione o dispositivo a partir da lista **Devices in current profile (Dispositivos no perfil atual)**
8. Clique em **Setup Device (Configuração do Dispositivo)**.

   Uma caixa de diálogo contendo os valores de configuração para o dispositivo se abre.
9. (Opcional) Na aba**Communication (Comunicação)**no campo**Alias (Pseudônimo)**, digite um nome ou outro identificador.

Nota: Para dispositivos usando comunicação serial, certifique-se que a porta serial selecionada corresponda à porta serial à qual o dispositivo está fisicamente conectado. Se um cabo de expansão serial for usado, então o número selecionado no perfil é o número do cabo mais dois.

Nota: O campo**Alias (Pseudônimo)**também pode ser referido como a caixa **Name (Nome)**e pode ser encontrado em outra aba em **Alias (Pseudônimo)**

- Se o dispositivo usa uma**Serial Port (Porta Serial)** como uma interface de comunicação, então, na lista de **COM Port Number (Número de Porta COM)**, selecione a porta COM à qual o dispositivo está conectado.
- Se o dispositivo usa **Ethernet** como uma interface de comunicação, então digite o **IP Address (Endereço IP)** designado ao dispositivo pelo administrador ou use o **Host Name (Nome do Host)** para o endereço.

- Se o dispositivo usa o **GPIB Board (Painel GPIB)** como uma interface de comunicação, então, não mude as configurações para o painel GPIB.

O restante dos valores pré-configurados para o dispositivo provavelmente está apropriado. Não altere. Para informações sobre as abas **Configuration (Configuração)** e **Communication (Comunicação)**, consulte a Ajuda.

10. Para restaurar os valores pré-configurados do dispositivo, na aba **Communication (Comunicação)**, clique em **Set Defaults (Definir Padrões)**.
11. Para salvar a configuração, clique em **OK**.
12. Repita a etapa *4* até a etapa *11* para cada dispositivo.
13. Clique em **OK** na caixa de diálogo **Create New Hardware Profile (Criar Novo Perfil de Hardware)**
14. Para ativar o perfil de hardware, no **Hardware Configuration Editor (Editor de configuração de hardware)**, clique em perfil de hardware.
15. Clique em **Activate Profile (Ativar Perfil)** .

    A marca de seleção torna-se verde. Se um X vermelho aparecer, então, há um problema com a ativação do perfil de hardware. Para mais informações, consulte *Solução de Problemas de Ativação do Perfil de Hardware na página 43*.

    Dica! Um perfil de hardware ativo não tem que ser desativado antes que outro seja ativado. Clique no perfil de hardware inativo e, em seguida, clique em **Activate Profile (Ativar Perfil)**. O outro perfil será desativado automaticamente.

16. Clique em **Close (Fechar)**.

Solução de Problemas de Ativação do Perfil de Hardware

Se um perfil de hardware não se tornar ativo, então uma caixa de diálogo se abre indicando qual dispositivo no perfil falhou. Uma falha no perfil pode ser devida a erros de comunicação.

1. Leia a mensagem de erro gerada. Dependendo da mensagem, pode haver um problema com um dispositivo ou como a comunicação está configurada.
2. Verifique se o dispositivo possui energia e se está ligado.
3. Verifique se a porta COM designada para o dispositivo está correta.
4. Verifique se as configurações de comunicação com o dispositivo (por exemplo, configurações do comutador DIP) estão definidas corretamente e correspondem às configurações na aba **Communication (Comunicação)**.
5. Desligue o dispositivo.
6. Aguarde 10 segundos.
7. Ligue o dispositivo.

    Aguarde até que todas as atividades para ligar o dispositivo estejam concluídas antes de tentar ativar o perfil de hardware novamente. Alguns dispositivos podem exigir 30 segundos ou mais para que as atividades para ligar sejam concluídas.

8. Ative o perfil no hardware.
9. Se o problema persistir, exclua o perfil com falha e crie um novo.
10. Se o problema persistir, entre em contato com o suporte técnico.

Projetos e Subprojetos

Criar Projetos e Subprojetos

Para usar uma estrutura de subprojeto dentro de um projeto, crie a estrutura subprojeto quando o projeto for criado.

1. Clique em **Tools (Ferramentas) > Project (Projeto) > Create Subproject (Criar Subprojeto).**
2. Digite um nome do projeto no campo **Project name (Nome do projeto)**.
3. (Opcional) Para usar subprojetos, selecione as pastas necessárias e, em seguida, use os botões de seta para movê-las para a lista **Subproject folders (Pastas de Subprojetos)**.
4. (Se forem utilizados subprojetos) No campo **Subproject name (Nome do Subprojeto)**, digite um nome para o primeiro subprojeto ou use a data existente.
5. (Opcional) Para usar esta organização de pasta para projeto e subprojeto para todos os novos projetos, marque a caixa de seleção **Set configuration as default for new projects (Definir configuração como padrão para novos projetos)**.

   Todos os novos projetos são criados com essa configuração de pasta.
6. Clique em **OK**.

Criar Subprojetos

Os subprojetos podem apenas ser criados em um projeto que tenha uma estrutura de subprojetos existente.

1. Na barra de ferramentas **Project (Projeto)**, da lista **Project (Projeto)**, selecione o projeto.
2. Clique em **Tools (Ferramentas) > Project (Projeto) Create Subproject (Criar Subprojeto).**
3. Na caixa **Subproject name (Nome do Subprojeto)**, digite um nome para o subprojeto ou use a data existente.
4. Clique em **OK**.

Copiar Subprojetos

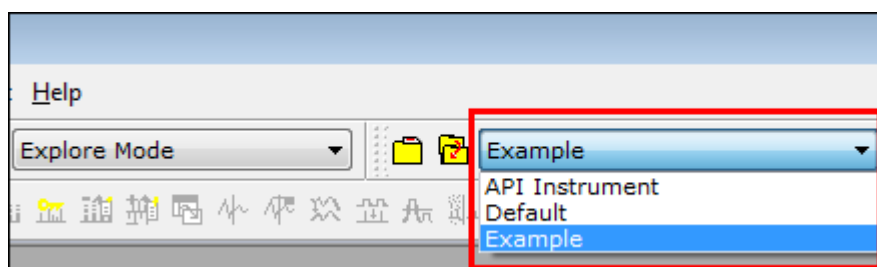
Um subprojeto pode ser copiado de outro projeto que possui subprojetos existentes. Se os subprojetos copiados contiverem pastas que também existem na pasta do projeto, então o software usa as pastas de nível do projeto.

1. Clique **Tools (Ferramentas) > Project (Projeto) Copy Subproject (Copiar Subprojeto)**.
2. Clique em **Browse** (Procurar) para navegar para a fonte do subprojeto na caixa de diálogo **Copy Subproject (Copiar Subprojeto)**.

3. Clique em **OK**.
4. Selecione o subprojeto da lista **Source Subproject** (Subprojeto de Origem).
5. Clique **Browse** (Procurar) para navegar ao destino do subprojeto
6. Digite o nome no campo **Target Subproject** (Subprojeto de Destino).
7. Clique em **OK**.
8. Faça um dos seguintes:
   - Copie todas as pastas e arquivos da **Subproject Source** (Subprojeto de Origem) para o **Subproject Destination** (Destino do Subprojeto), selecione a caixa de verificação **Copy Contents** (Copiar Conteúdo).
   - Para copiar apenas as pastas na mesma estrutura no **Subproject Destination** (Destino do Subprojeto), tenha certeza de que a caixa de verificação **Copy Contents** (Copiar Conteúdo) está desmarcada.
9. Clique em **Copy** (Copiar).

Alterar Entre Projetos e Subprojetos

- Na barra de ferramentas do software, a partir da lista do projeto, clique no projeto ou subprojeto necessário.

Figura 5-5 Lista do Projeto

A lista do projeto nesta imagem mostra as pastas **API Instrument**, **Default (Padrão)** e **Example (Exemplo)**.

Pastas de Projetos Instaladas

Três pastas de projetos são instaladas com o software: **API Instrument (Instrumento API)**, **Default (Padrão)** e **Example (Exemplo)**.

Pasta API Instrument

A pasta **API Instrument** é única e muito importante para o correto funcionamento do espectrômetro de massas. A pasta **API Instrument** contém as informações necessárias para ajustar e calibrar o espectrômetro de massas. Estas informações incluem arquivos de configuração dos parâmetros, arquivos de referência, arquivos de dados do instrumento que contém informações de calibração e resolução e os métodos de aquisição usados durante o ajuste automático. A pasta **API Instrument** também contém os arquivos de dados para as corridas de ajuste manual que foram realizadas usando o botão **Start** (Iniciar) ao invés do botão **Acquire**

(Adquirir). Estes arquivos de dados são salvo automaticamente na pasta **API Instrument** na pasta **Tuning Cache** e nomeados com a data e a hora em que foram criados. A pasta **Tuning Cache** é limpa automaticamente de forma periódica.

Pasta Padrão

A pasta **Default** (Padrão) contém pastas que estão presentes nos novos projetos e servem como um modelo para os novos projetos.

Pasta de Exemplo

A pasta **Example (Exemplo)** contém os métodos da amostra e arquivos de dados. O usuário pode praticar trabalhar com os modos **Explore (Explorar)** ou **Quantitate (Quantificar)** usando os arquivos de dados de exemplo. Os arquivos de exemplo são ordenados nas subpastas por tipo de espectrômetro de massas e área de aplicação.

Cópia de Segurança da Pasta API Instrument

Faça uma cópia de segurança da pasta **API Instrument** regularmente e após a realização da manutenção de rotina.

- Copie a pasta **API Instrument**, cole-a em um local diferente, de preferência outro computador, e então, renomeie a pasta. Use a data e uma referência do espectrômetro de massas, se houver mais de um espectrômetro de massas, quando a pasta for nomeada. Para recuperar a pasta, renomeie a atual pasta **API Instrument**, copie a cópia de segurança na pasta **Projects**, e então mude o nome da cópia de segurança na pasta para **API Instrument**.

Recuperar a Pasta API Instrument

Faça uma cópia de segurança da pasta **API Instrument** regularmente e após a realização da manutenção de rotina.

1. Renomeie a atual pasta **API Instrument**.
2. Copie a pasta de segurança na pasta **Projects**.
3. Mude o nome da pasta de segurança para **API Instrument**.

Instruções de operação - Ajustar e Calibrar 6

Materiais necessários
• Soluções de Ajuste que estão fornecidas no Kit de Elementos Químicos Padrão enviado com o sistema. Se necessário, um novo kit pode ser encomendado da AB SCIEX. • Tubo de amostra PEEK vermelho.

Pré-requisitos
• O spray está estável e a solução de ajuste correta está sendo usada.

Otimize o espectrômetro de massas

O procedimento a seguir descreve como verificar o desempenho do espectrômetro de massas. Para mais informações sobre como usar outras opções de desempenho do instrumento, consulte Ajuda.

1. Na barra de navegação, em **Tune and Calibrate (Ajustar e Calibrar)**, clique duas vezes em **Manual Tuning (Ajuste Manual)**.
2. Execute o método de calibração e confirme que o Cromatograma de Íon Total (TIC) está estável e que os picos de interesse estão presentes no espectro.
3. Na barra de navegação, em **Tune and Calibrate (Ajustar e Calibrar)**, clique duas vezes em **Instrument Optimization (Otimização do Instrumento)**.

   A caixa de diálogo **Instrument Optimization (Otimização do Instrumento)** abre.
4. Clique em **Verify instrument performance (Verificar desempenho do instrumento)**.
5. Clique em **Next (Próximo)**.
6. Clique em**Approved Tuning (Ajuste Aprovado)**
7. Clique em **Next (Próximo)**.
8. Selecione uma **Tuning Solution (Solução de Ajuste)**.

   Dependendo da solução selecionada, estão disponíveis diferentes modos:
   a. Clique em uma polaridade.
   b. Se disponível, clique em **Q1** e **Q3** na seção **Quad**.
   c. Se disponível, clique nas velocidades de varredura exigidas.
9. Clique em **Next (Próximo)**.
10. Se a página **Select a mode (Selecionar um modo)** abrir, então selecione **Automatic (Automático)**.

11. Clique em **Next (Próximo)**.
12. Clique em **GO (Ir)**.

    A caixa de diálogo **Verifying or Adjusting Performance (Verificando ou Ajustando Desempenho)** abre. Depois do processo ter sido concluído, o **Results Summary (Resumo dos Resultados)** abre. Para mais informações, consulte a Ajuda.
13. Se aplicável (dependendo das opções selecionadas), mude as soluções quando sugerido.

Sobre a Verificação ou Ajuste da Caixa de Diálogo de Desempenho

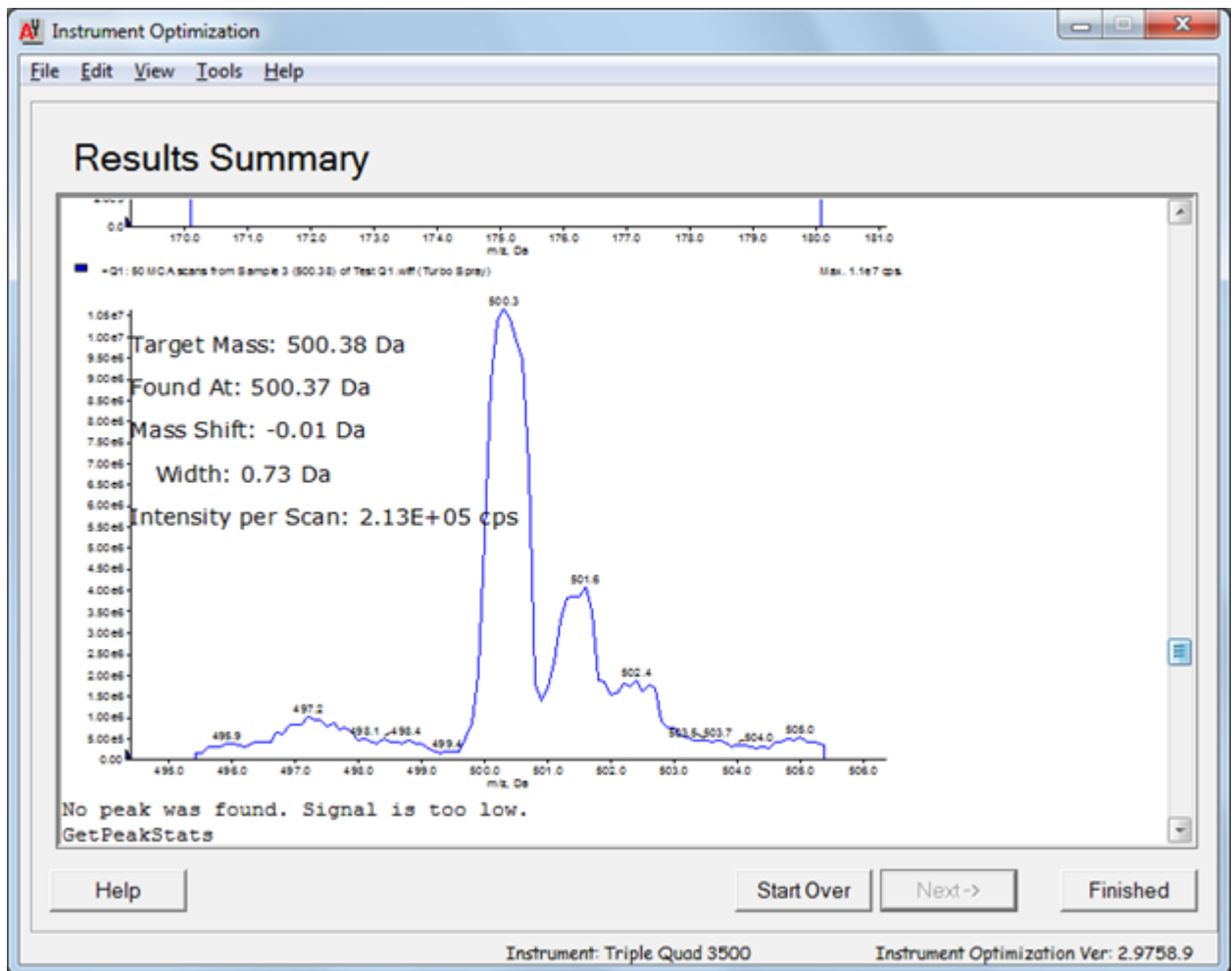
O canto superior esquerdo mostra a parte do instrumento que está sendo otimizado.

O gráfico de **Espectro Atual** mostra o espectro da varredura atual, a varredura ideal selecionada pelo software ou a varredura no valor do parâmetro atual quando os resultados do software são vistos no modo interativo.

Os **Instrument Optimization Decision Plots** (Gráficos de Decisão de Otimização do Instrumento), no gráfico na parte superior direita, mostram dinamicamente as curvas de intensidade versus voltagem dos parâmetros que estão sendo otimizados naquele momento.

Resumo dos Resultados

O **Results Summary** (Resumo dos Resultados) é um registro de quaisquer configurações do instrumento que são realizadas pelo assistente de **Instrument Optimization** (Otimização do Instrumento).

Figura 6-1 Resumo dos Resultados

O Resumo dos Resultados inclui o local dos arquivos de dados e as cópias de segurança das configurações do instrumento, bem como as mudanças passo-a-passo e resultados durante a otimização.

O **Results Summary** (Resumo dos Resultados) também mostra um relatório de verificação. Este relatório contém um espectro de massa para cada massa relevante para os modos de varredura sendo verificados. O espectro é rotulado com a massa alvo, onde a massa foi encontrada, o deslocamento de massa, a largura do pico e a intensidade do pico. O espectro pode ser usado como um registro visual do formato do pico ou modo de desempenho da varredura. Uma tabela de resumo dos resultados segue o espectro.

O **Results Summary** (Resumo dos Resultados) é salvo como um documento na pasta indicada no topo do relatório. na seguinte pasta: **\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimization**. Os usuários podem imprimir o **Results Summary** (Resumo dos Resultados) ou abrir um **Results Summary** (Resumo dos Resultados) anteriormente salvo.

Instruções de Operação – Otimização Automática 7

Esta seção descreve como:

- Otimizar automaticamente o analito usando o assistente **Compound Optimization (Otimização do Composto)**.
- Escolha entre a infusão e a análise do fluxo de injeção (FIA).
- Use um método de infusão para otimizar os parâmetros dependentes do composto.
- Use um método FIA para otimizar os parâmetros dependentes de composto e fonte de íons.

Pré-requisitos
• Um espectrômetro de massas ajustado e calibrado. • Um método de aquisição otimizado. • Para introdução da amostra por FIA, uma bomba LC e um autoamostrador no perfil de hardware. • Todos os dispositivos periféricos necessários, incluindo uma bomba de seringa, se necessária, e os componentes LC no perfil do hardware.

Materiais necessários
Para ajustar os parâmetros do instrumento para os compostos particulares, as seguintes etapas são recomendadas. A mistura dos quatro compostos é usada para ilustração das etapas do procedimento. • Uma seringa, preferencialmente uma seringa de 1,0 mL. • Fase móvel: 1:1 de acetonitrila:água + 2 mM de acetato de amônio + ácido fórmico a 0,1%. • Frascos do autoamostrador. • Mistura de quatro compostos (50 ng/mL), consistindo de reserpina, minoxidil, tolbutamida e rescinamina. A solução pode ser usada para a infusão e a FIA. A concentração é dependente do sistema. Use uma solução que seja 49,9% de acetonitrila, com 50% de água deionizada e 0,1% de ácido fórmico como diluente.

Sobre a Otimização Automática

A otimização automática primeiro verifica a presença dos compostos. As voltagens de vários parâmetros da via do íon são aumentadas ou reduzidas gradualmente para determinar a intensidade máxima do sinal (varredura Q1) para cada íon. Um arquivo de texto é gerado e mostrado durante o processo de otimização. Este arquivo registra os diversos experimentos realizados e os valores ideais para cada parâmetro. Uma pasta do arquivo contendo todos os experimentos realizados também é gerada e pode ser encontrada abrindo a

pasta do arquivo de dados no modo **Explore** (Explorar). Para cada experimento realizado, um método de aquisição também é gerado e salvo na pasta **Acquisition Method** (Método de Aquisição).

Durante o processo de otimização, selecione como o íon precursor e os íons de produto correspondentes serão escolhidos.

Tipos de Introdução da Amostra

Infusão

A infusão é o fluxo contínuo da amostra em baixas taxas de vazão na fonte de íons usando uma bomba de seringa. Durante o processo de otimização por infusão, o software pode selecionar o precursor e íons produto e otimizar o declustering potential (potencial de ionização), colision energy (energia de colisão) e collision cell exit potential (potencial de saida da cela de colisão). As voltagens dos parâmetros da via do íon são aumentadas ou reduzidas gradualmente para determinar a intensidade máxima do sinal para os íons produto.

Use a otimização por infusão para otimizar os parâmetros dependentes do composto apenas em taxas de vazão muito baixas daquelas usadas durante a análise LC/MS.

FIA

FIA é a injeção de uma amostra pelo autoamostrador para o espectrômetro de massas usando LC. Durante o processo de otimização da FIA, injeções múltiplas de amostras são realizadas testando-se vários tipos de parâmetros dependentes da fonte de íons ou de parâmetros dependentes do composto que são alterados entre as injeções. Otimização do composto por FIA otimiza os parâmetros através da realização de experimentos em sequencia. Um parâmetro dependente do composto é otimizado primeiro seguido pelo próximo parâmetro dependente do composto. Ele otimiza para parâmetros dependentes da fonte de íons, fazendo uma injeção para cada valor.

Os parâmetros do composto devem ser estreitados usando pelo menos mais dois ciclos FIA. Use a otimização FIA para otimizar tanto os parâmetros dependentes de composto como os parâmetros dependentes da fonte, usando LC em vazões mais altas.

Tabela 7-1 Diferenças entre os Métodos de Introdução da Amostra

Método	Dispositivos Necessários	Parâmetros	Intervalo de Taxa de Vazão Típica
Infusão	Bomba da seringa	Dependente do composto	5 µL/min a 25 µL/min
FIA	Bomba LC e autoamostrador.	Dependente da fonte e dependente do composto	25 µL/min a 1000 µL/min

Durante a otimização, um arquivo de texto é gerado e mostrado. Este arquivo registra os diversos experimentos realizados e os valores ideais para cada parâmetro. Uma pasta do arquivo contendo todos os experimentos também é gerada. Para cada experimento realizado, um método de aquisição também é gerado e salvo na pasta **Acquisition Method (Método de Aquisição)**.

Otimizar Automaticamente para um Analito Utilizando Infusão

Nesta seção, os usuários vão executar a otimização MS/MS automática utilizando infusão com um íon precursor conhecido e um íon produto desconhecido.

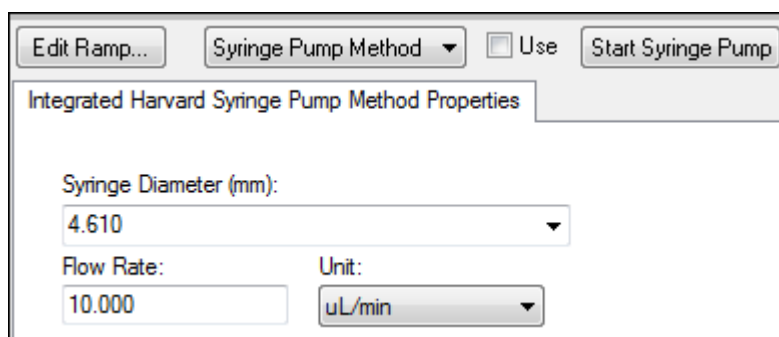
Confirmar a Presença dos Compostos

Confirmar a presença dos compostos de interesse antes de continuar a otimização automática.

1. Crie um projeto.
2. Ative o perfil no hardware.
3. Realize a infusão do composto em solução na taxa de 5 µL/min a 10 µL/min.
4. Na barra de navegação, em **Tune and Calibrate** (Ajustar e Calibrar), clique duas vezes em **Manual Tuning** (Ajuste Manual).
5. Na aba **Syringe Pump Method Properties** (Propriedades do Método da Bomba da Seringa), digite os parâmetros mostrados na *Tabela 7-2*.

Tabela 7-2 Aba de Propriedades do Método da Bomba da Seringa

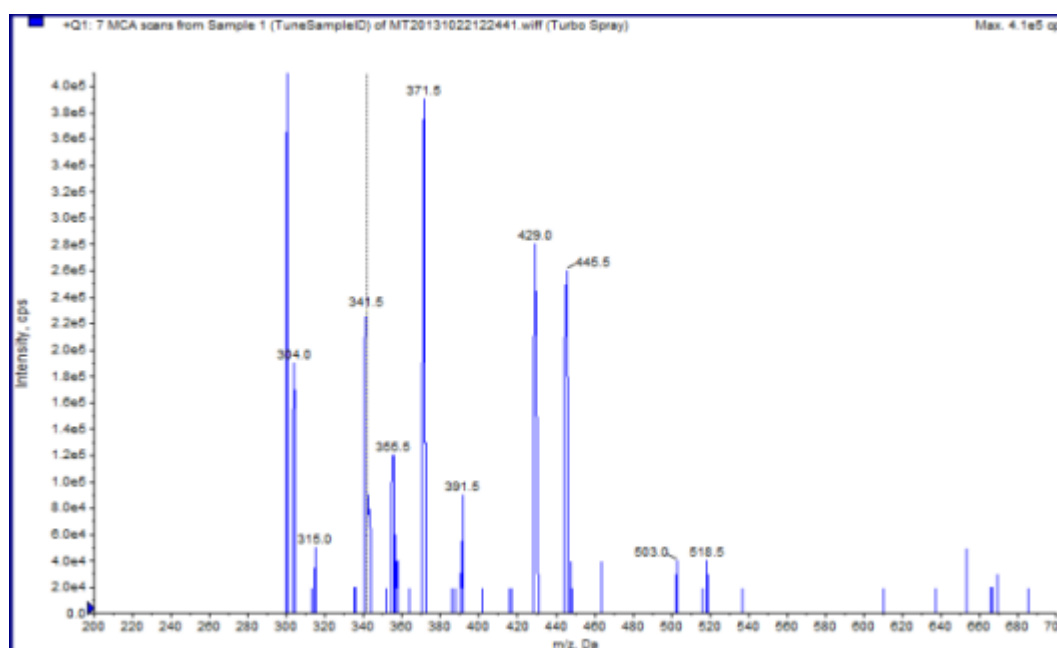
Parâmetro	Valor
Diâmetro da Seringa	Seringa dependente; seringa de 1,0 mL possui 4,610 mm
Taxa de Vazão	10
Unidade	µL/min

Figura 7-1 Aba de Propriedades do Método da Bomba da Seringa

6. Clique em **Start Syringe Pump** (Iniciar Bomba da Seringa).
7. Clique em **MS Method** (Método MS) a partir da lista do método.
8. Clique em **Start** (Iniciar).

9. Aguarde até que um TIC uniforme seja mostrado à esquerda e os picos sejam mostrados à direita e então clique em **Stop** (Parar).
10. Selecione a caixa de verificação **MCA**.
11. Digite **10** no campo **Cycles** (Ciclos).
12. Clique em **Start** (Iniciar).

    Quando as dez varreduras forem concluídas, o gráfico deve mostrar as massas dos quatro compostos como íons.

    A intensidade dos compostos deve ser muito maior do que os menores picos de ruído, mas não tão grandes de forma que os picos de ruídos não sejam vistos. No primeiro caso, o pico pode não ser um composto real. No segundo caso, a concentração pode estar muito alta para o software otimizar de forma apropriada.

Figura 7-2 Íons do Composto

Realize a Otimização Automática do MS e MS/MS Usando Infusão com um Íon Precursor Conhecido e um Íon Produto Desconhecido

A otimização automática para análise do MS/MS otimiza determinados parâmetros dependentes do composto para uma ou mais transições MRM. O software encontra o íon de interesse e otimiza os parâmetros dependentes de composto para ter a máxima sensibilidade para o composto. O software eleva a CE (energia de colisão) e seleciona os fragmentos mais intensos cumprindo todos os critérios de seleção de íon produto.

Se o sinal de varredura do Q1 Inicial for muito alto, então o software tenta reduzir a CEM (detector) para manter os íons dentro da faixa de variação do detector. Se o sinal ainda for muito alto depois da redução da CEM (detector), então o processo é interrompido e é exibida uma mensagem de erro. Dilua a solução e, em seguida, reinicie a otimização. Certifique-se de fazer a purga da linha de infusão. Os parâmetros da última otimização quantitativa são armazenados.

1. Na barra de navegação, em **Tune and Calibrate (Ajustar e Calibrar)**, clique duas vezes em **Compound Optimization (Otimização do Composto)**.
2. Na página **Instrument Settings (Configurações do Instrumento)**, na seção **Inlet (Entrada),** clique em **Infusion (Infusão)**.
3. Clique em **MS/MS Analysis (Análise MS/MS)**na seção **Mass Spectrometer (espectrômetro de massas)**.
4. Clique em **Next (Próximo)**.
5. Na página **Ions to use in MS/MS Analysis (Íons para utilizar na Análise MS/MS)**, digite os parâmetros mostrados na *Tabela 7-3*.

Tabela 7-3 Página de Análise MS/MS

Parâmetro	Valor
Íon MW: Janela Buscar	2.500
Resolução	Unidade
Polaridade	Positivo
Íon Produto	Selecionar Automaticamente
Resolução	Unidade

Nota: O algoritmo de otimização procura pelo pico mais intenso na janela de busca que foi especificada. Se o pico mais intenso na janela não for a massa de interesse, então o software otimiza o íon errado.

6. Clique em **Criteria (Critérios)** próximo a opção **Auto Select (Selecionar Automaticamente)**.
7. Se a caixa de diálogo **Product Ion Auto Selection Criteria (Critérios de Seleção Automática de Íon Produto)**, digite os parâmetros apresentados na *Tabela 7-4*.

Tabela 7-4 Parâmetros da caixa de diálogo Product Ion Auto Selection Criteria (Critérios de Seleção Automática de Íon Produto)

Parâmetro	Valor	Descrição
A partir do Mais Intenso (picos)	3	O número de fragmento de picos a ser otimizado. O algoritmo irá gerar um espectro de varredura de íons produto, enquanto aumenta a CE no modo MCA. Neste exemplo, ele irá então tomar os três íons fragmento mais intensos do espectro e continuará a otimização MS/MS somente com esses fragmentos.
Criar método final usando (picos mais intensos)	2	O número de íons fragmento por íon precursor (composto alvo) a ser incluído automaticamente no método de aquisição. O número especificado define o número de transições MRM a ser incluído para cada composto alvo no método e a ordem de preferência é baseada na intensidade do íon produto. Dois é um valor inicial melhor do que um porque normalmente são necessários dois íons produtos para a quantificação. Inicie com três no caso de haver um problema com um dos dois melhores. Volte e o terceiro já está identificado.
Excluir Íons Produto dentro de ± (Da do Íon Precursor m/z)	20.000	O valor Da que define a janela de exclusão ao redor do íon precursor de forma que os íons fragmento caiam dentro desta janela não é selecionado para otimização MRM. Por exemplo, se o usuário digitar ± 5 Da para um íon precursor de 500 *m/z*, então qualquer íon fragmento dentro da região 495 a 505 *m/z* será excluído. Isso previne que o íon precursor seja otimizado.
Min. Massa para Íon Produto (Da)	60.000	A massa de fragmento mais baixa a ser considerada para otimização. Use esta opção para estreitar ou aumentar a janela de íons fragmentos a serem considerados a partir da massa do precursor.
Limiar para o Íon Produto (cps)	100.000	Número mínimo de contagens para um íon produto ser considerado.

8. Clique em **OK** para salvar os critérios de seleção.
9. Clique em **Next (Próximo)**.
10. Na caixa de diálogo **Target Components (Componentes Alvo)**, digite os parâmetros apresentados na *Tabela 7-5*.

Nota: O nome do composto deve ser único para cada composto ou transição.

Tabela 7-5 Parâmetros de Diálogo dos Compostos Alvo

Composto Alvo	Campo	Valor*
Reserpina	Nome do composto	Reserpina
	MW (Da)	609,3
	Nº Cargas	1
Minoxidil	Nome do composto	Minoxidil
	MW (Da)	210,2
	Nº Cargas	1
Tolbutamida	Nome do composto	Tolbutamida
	MW (Da)	271,1
	Nº Cargas	1
Rescinamina (IS)	Nome do composto	Rescinamina
	MW (Da)	635,3
	Nº Cargas	1
*Digite a massa iônica exata.		

11. Clique em **Finish (Concluir)** para iniciar o processo de otimização.

    A tela mostra duas janelas, uma janela de arquivo de texto e uma janela de aquisição. O usuário pode precisar minimizar uma delas para ver a outra. O experimento que está sendo executado é mostrado na parte superior da janela de aquisição. O eixo x mostra o parâmetro que é otimizado para cada experimento. A janela de arquivo de texto é atualizada conforme os resultados são gerados.

    Após a otimização ser concluída, um arquivo de aquisição MRM é criado e nomeado **[compound]_QOpt_FinalMRM_Pos.dam**, onde [compound] é o primeiro composto na página **Target Components (Componentes Alvo)**.

Confira os resultados de otimização

No final da otimização, os parâmetros otimizados são salvos em um método de aquisição. Todos os arquivos .dam e .wiff gerados no processo de otimização são salvos na pasta **Acquisition Method (Método de Aquisição)** e em uma subpasta na pasta **Data (Dados)**, respectivamente, no projeto. O nome da subpasta é gerado usando o nome do composto e a data.

1. Depois de completar a otimização, imprima o arquivo de texto contendo os parâmetros otimizados para cada composto.
2. Clique no **menu > File (Arquivo)** e selecione o arquivo **Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam**
3. Compare os valores do arquivo de texto com aqueles no arquivo .dam.
4. Confira os conteúdos das seguintes pastas:

- **Data (Dados)**: procure por meio de todas as corridas realizadas durante a otimização. Compare um arquivo .wiff com o valor otimizado no método ou parâmetros impressos.
- **Acquisition Method (Método de Aquisição)**: arquivo **Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam e outros arquivos .dam** criados durante a otimização.
- **Log (Registro)**: Arquivo do relatório (.rtf) mostrado durante o processo de otimização.

Otimizar Automaticamente para um Analito Usando FIA

Antes de otimizar usando FIA, o usuário já deve ter identificado os íons para os compostos e salvado o método de aquisição básico. Pelo fato de a otimização usando FIA necessita que um autoamostrador e uma bomba LC estejam ativos no perfil do hardware, adicione estes dois dispositivos ao método de aquisição básico.

Nota: Embora o FIA possa ser usada para otimizar os parâmetros dependentes de composto, isto não é tipicamente realizado devido ao número de ciclos necessários para obter os valores de parâmetro ideais.

Antes de começar, crie um método de aquisição LC/MS/MS com base no arquivo **Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam** e nomeie o novo método. Tenha certeza de que o projeto contém um método de aquisição.

1. Faça uma diluição da mistura dos quatros compostos e coloque no autoamostrador.

   É necessário que tenha amostra suficiente para revisar cada variável de cada parâmetro e ter sobras da amostra. Por exemplo, para a temperatura correr em 300°C, 400°C e 500°C, é necessário mais de 30 µL (injeção de 3 × 10 µL).

2. Confirme que **LC Sync** esteja selecionado no método.

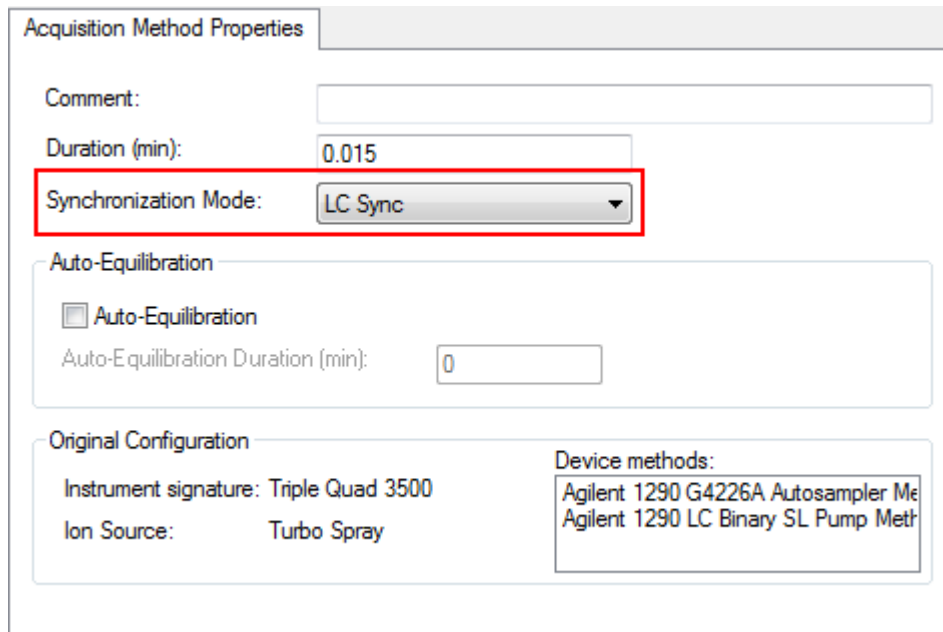
Figura 7-3 Método de Aquisição com LC Sync Selecionado

3. Tenha certeza de que a fonte de íons e os parâmetros do gás estejam configurados em níveis razoáveis de forma que o espectrômetro de massas não seja contaminado.
4. Configure o micrômetro horizontal em 5 mm.
5. Configure o micrômetro vertical na fonte de íons para a taxa de vazão. Como um ponto inicial, use o parâmetro na *Tabela 7-6*.

Tabela 7-6 Parâmetros Verticais da Fonte de Íons

Taxa de Vazão	Parâmetros verticais iniciais
1 µL/min a 20 µL/min	10 mm
20 µL/min a 250 µL/min	5 mm
250 µL/min a 500 µL/min	2 mm
500 + µL/min	0 mm

6. Configure os valores para o sistema LC e use um volume de injeção do autoamostrador de 10 µL. Use a mesma concentração ou inferior para o experimento de infusão.

   As bombas do LC devem ser configuradas para uma corrida isocrática sem coluna. Os tempos de MS e LC devem ser os mesmos para coletar os dados apropriados.

   A taxa de vazão e o percentual das fases móveis usadas devem ser baseados na coluna LC usada, a cromatografia geral e a concentração aproximada da fase móvel na qual os compostos de interesse eluem.
7. Na barra **Navigation** (Navegação), abaixo de **Tune and Calibrate** (Ajustar e Calibrar), clique duas vezes em **Compound Optimization** (Otimização do Composto).

8. Na página **Instrument Settings** (Configuração do Instrumento), dependendo da coluna sendo usada, digite os parâmetros mostrados na *Tabela 7-7* e então selecione o método de aquisição padrão apropriado.

Tabela 7-7 Parâmetros de Configuração do Instrumento

Parâmetro	Valor
Inlet (Entrada)	FIA
Rack Code (Código da bandeja do amostrador)	Autoamostrador específico
Rack position (Posição da bandeja do amostrador)	Autoamostrador específico
Volume de Injeção	10 µL
Espectrômetro de massas	Análise MS/MS

9. Clique em **Next** (Próximo).
10. Tenha certeza de que a caixa de verificação **Std.** não esteja selecionada.

    Selecionar a caixa de verificação e indicar qual MRM corresponde aos padrões internos. Os padrões internos não são otimizados durante o processo de otimização.
11. Na seção **Resolution** (Resolução), selecione **Unit** (Unidade) em ambos os campos **Q1 Resolution** (Resolução Q1) e **Q3 Resolution** (Resolução Q3).

Figura 7-4 Campos de Resolução Q1 e Q3

12. Clique em **Next** (Próximo).
13. Na página **FIA Source Parameters** (Parâmetros da Fonte FIA) , digite os números que são menores ou maiores que o valor original, desde que ainda estejam dentro das especificações. Tenha certeza de não reduzir muito quaisquer configurações para manter o sistema limpo. Use os parâmetros mostrados na *Tabela 7-8*.

Tabela 7-8 Parâmetros para a Página de Parâmetros da Fonte de FIA

Parâmetro	Selecionar a Caixa de Verificação Otimizar?	Valores de Otimização
Cortina de gás	Sim	20;40;55
Gás de colisão	Não	—

Tabela 7-8 Parâmetros para a Página de Parâmetros da Fonte de FIA (continuação)

Parâmetro	Selecionar a Caixa de Verificação Otimizar?	Valores de Otimização
Voltagem do IonSpray	Sim	1500;2000;3000;4000;5000
Temperatura	Sim	300;400;500;600;700
Fonte de íons Gás 1	Sim	40;50;60;70;80;90
Fonte de íons Gás 2	Sim	40;50;60;70;80;90
Interface do Aquecedor	Não	—

14. Selecione **1** ou **2** ao lado de **Replicate Injection for each Parameter** (Duplicar Injeção para cada Parâmetro).

    O número total de injeções e o volume da amostra total são calculados com base nas especificações aqui descritas. Observe o volume de amostra total necessário. O volume da amostra pode ser alto dependendo em quantas variáveis para cada parâmetro estão sendo otimizadas, pois cada variável é um método separado.

Figura 7-5 Duplicar Injeção para cada Parâmetro

15. Clique em **Next** (Próximo).
16. Na página de **FIA Compound Parameters** (Parâmetros de Composto FIA) , digite os parâmetros mostrados na *Tabela 7-9*.

Nota: Os valores na *Tabela 7-9* são valores sugeridos. Para mais informações, consulte a Ajuda.

Tabela 7-9 Página de Parâmetros do Composto FIA

Parâmetro	Selecionar a Caixa de Verificação Otimizar?	Valores de Otimização
Declustering Potential	Sim	60;80;100;120;200
Potencial de Entrada	Não	—

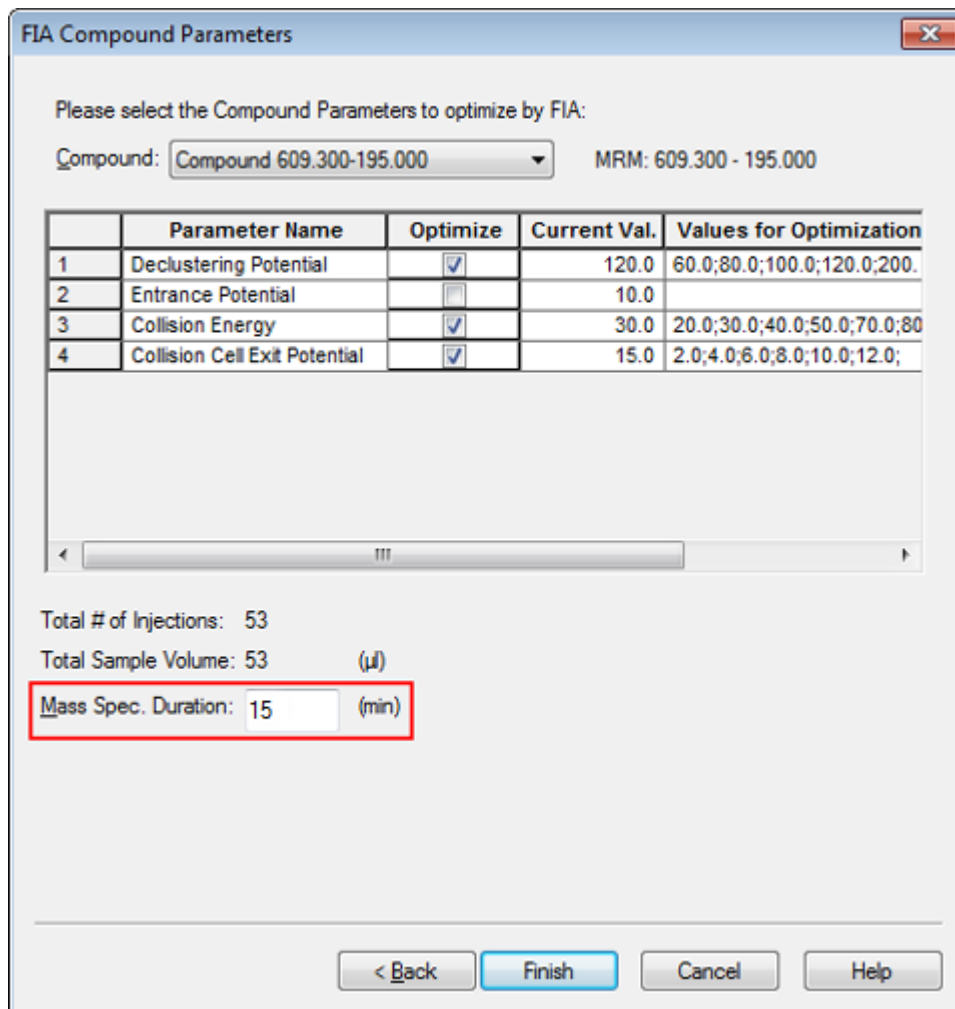
Tabela 7-9 Página de Parâmetros do Composto FIA (continuação)

Parâmetro	**Selecionar a Caixa de Verificação Otimizar?**	**Valores de Otimização**
Energia de Colisão	Sim	20;30;40;50;70;80;100
Potencial de Saída da Célula de Colisão	Sim	2;4;6;8;10;12

O número total de injeções e volume dependente da amostra se atualiza automaticamente. Em contraste com os parâmetros da fonte de íons, que precisam de uma injeção por valor por réplica, os parâmetros dependentes de composto precisam apenas de uma injeção por parâmetro. Um experimento em ciclo é realizado para cada parâmetro. Os valores são alternados entre as varreduras dentro de uma injeção.

Nota: Não insira muitos valores que irão prevenir a avaliação adequada do parâmetro.

17. Digite **15** no campo **Mass Spec. Duration**. Este valor deve ser pelo menos a duração de tempo de cada injeção.

Figura 7-6 Campo Mass Spec. Duration

18. Clique em **Finish** (Concluir) para iniciar o processo de otimização.

    O software otimiza a fonte de íons especificada e os parâmetros dependentes de composto para ter a máxima sensibilidade para a transição MRM do composto. Conforme o software procede pela otimização, ele cria um relatório **Compound Optimization** (Otimização de Composto).

    Para obter os parâmetros otimizados, esta rotina deve ser repetida. Tipicamente, a fonte de íons e os parâmetros do gás devem ser restringidos usando mais um ciclo FIA.

19. O software gera diversos métodos de aquisição. Abra o método FIA otimizado final chamado *_FIA_sample_1.

20. Salve este método usando um nome simples.

Instruções de Operação - Métodos de Aquisição 8

Recomenda-se que somente usuários que tenham proficiência no desenvolvimento do método criem ou modifiquem os métodos de aquisição e quantificação. Consulte a seção Sobre Pessoas e Funções no *Guia do Diretor do Laboratório* para mais informações sobre funções e segurança.

Criar um Método de Aquisição Usando o Editor do Método de Aquisição

Dica! Se os usuários estão criando um novo arquivo do método de aquisição a partir de um arquivo existente, então alguns ou todos os métodos do dispositivo periférico no método de aquisição podem ser usados.

Apenas dispositivos configurados no perfil de hardware ativo aparecem no painel **Acquisition method** (Método de aquisição). Quaisquer dispositivos adicionados ao perfil do hardware também devem ser adicionados aos métodos de aquisição existentes. Para mais informações sobre os dispositivos, consulte o *Guia de Configuração para Dispositivos Periféricos*.

1. Tenha certeza de que um perfil de hardware contendo o espectrômetro de massas e os dispositivos periféricos está ativo.
2. Na barra de Navegação, abaixo de **Acquire** (Adquirir), clique duas vezes em **Build Acquisition Method** (Criar Método de Aquisição).
3. Selecione um **Synchronization Mode** (Modo de Sincronização) na aba **Acquisition Method Properties** (Propriedades do Método de Aquisição).
4. (Opcional) Selecione a caixa de verificação **Auto-Equilibration** (Autoequilíbrio) e então digite o tempo de equilíbrio necessário, em minutos.
5. Clique no ícone **Mass Spec** (Espec. de Massas) no painel **Acquisition method** (Método de Aquisição).
6. Selecione um **Scan type** (Tipo de varredura) na aba **MS**.
7. Digite os valores nos campos, conforme necessário. Consulte *Parâmetros na página 68*.
8. Na aba **Advanced MS** (MS Avançada), digite os valores nos campos, conforme necessário.
9. Na aba **MS**, clique em **Edit Parameters** (Editar Parâmetros).
10. Na aba **Source/Gas** (Fonte/Gás), especifique os valores nos campos, conforme necessário.
11. Na aba **Compound** (Composto), especifique os valores nos campos, conforme necessário, e então clique em **OK**.
12. Clique em um ícone do dispositivo e depois selecione os parâmetros para o dispositivo.
13. Adicione quaisquer períodos adicionais e experimentos. Consulte *Adicionar um Experimento na página 66* e *Adicionar um Período na página 66*.

14. Clique em **File (Arquivo) > Save (Salvar).**

Configurar a Bomba da Seringa

1. Clique no ícone da **Syringe Pump** (Bomba da seringa) no painel **Acquisition Method** (Método de Aquisição).

   A aba **Syringe Pump Method Properties** (Propriedades do Método da Bomba da seringa) abre no editor do painel **Acquisition Method** (Método de Aquisição).
2. Digite o diâmetro da seringa no campo **Syringe Diameter (mm)** (Diâmetro da Seringa).
3. Digite a taxa de vazão no campo **Flow Rate** (Taxa de Vazão).
4. Selecione a unidade da vazão na lista **Unit** (Unidade).

Adicionar um Experimento

1. Clique com o botão direito no período e então clique em **Add experiment** (Adicionar experimento).

   Um experimento é adicionado abaixo do último experimento no período.

   Nota: Um experimento não pode ser inserido entre os experimentos ou períodos. Os usuários podem apenas adicionar um experimento ao final do período.

2. Selecione o dispositivo apropriado ou parâmetros do instrumento no painel **Acquisition Method Editor (Editor do Método de Aquisição)**.

   Nota: Os usuários não podem usar diversos períodos em um experimento IDA.

Adicionar um Período

- No painel **Acquisition method** (Método de Aquisição), clique com o botão direito no ícone **Mass Spec** (Espec. de Massas) e depois clique em **Add period** (Adicionar período).

  Um período é adicionado abaixo do último período criado.

  Nota: Os usuários não podem usar diversos períodos em um experimento IDA.

Copiar um Experimento em um Período

1. Abre um método de múltiplos períodos.
2. No painel **Acquisition method** (Método de Aquisição), pressione a tecla **Ctrl** e arraste o experimento para o período.

   O experimento é copiado abaixo do último experimento no período.

Copiar um Experimento dentro de um Período

Use este procedimento para adicionar experimentos iguais ou semelhantes para um período, se a maioria ou todos os parâmetros forem os mesmos.

- Clique com o botão direito no experimento e, em seguida, clique em **Copy this experiment (Copiar este experimento)**.

  Uma cópia é adicionada abaixo do último experimento criado. Isso é útil quando experimentos iguais ou semelhantes são adicionados a um métodos de aquisição.

Técnicas de Varredura

MS: em varreduras MS, também conhecidas como varreduras MS simples, os íons são separados de acordo com sua relação massa-carga. (*m/z*) Uma varredura MS simples pode ser utilizada para determinar o peso molecular de um composto. Varreduras MS simples também podem ser referidas como varreduras de pesquisa. Varreduras MS não fornecem qualquer informação quanto ao elemento químico auxiliar dos íons diferentes a não ser a relação *m/z*. Realize tipos de varredura MS/MSpara obter mais informações sobre os íons.

MS/MS: varreduras MS/MS são usadas para identificar ou confirmar uma espécie molecular. Para varreduras MS/MS em sistemas de quadrupolo triplo, a fragmentação do íon precursor ocorre na célula de colisão.

Se energia suficiente for usada, então, o íon precursor se fragmenta para produzir íons produto característicos.

Tipos de Varredura no Modo Quadrupolo

Os instrumentos de quadrupolo triplo têm capacidade de Monitoramento de Reações Múltiplas (MRM) de alta sensibilidade necessária para os experimentos de quantificação. Além disso, eles têm tipos de varredura altamente específicos, tais como íon precursor e varreduras de perda neutra, que permitem que uma pesquisa mais avançada seja executada sobre as componentes das amostras.

Q1 MS (Q1): Um tipo de varredura completa usando o primeiro quadrupolo (Q1). A intensidade de íons é retornada para cada massa na faixa de varredura.

Q1 Multiple Ions (Q1 MI) (Múltiplos Íons Q1): Um tipo de varredura de amplitude zero usando o quadrupolo Q1. A intensidade de íons é retornada somente para as massas especificadas.

Q3 MS (Q3): Um tipo de varredura completa usando o terceiro quadrupolo (Q3). A intensidade de íons é retornada para cada massa na faixa de varredura.

Q3 Multiple Ions (Q3 MI) (Múltiplos Íons Q3): Um tipo de varredura de amplitude zero usando o terceiro quadrupolo (Q3). A intensidade de íons é retornada somente para as massas especificadas.

MRM (MRM): Uma varredura MS/MS em que um íon selecionado pelo usuário é transmitido através do quadrupolo Q1 e fragmentado na célula de colisão Q2. O quadrupolo Q3 é então usado para especificar qual íon fragmento entra no detector. Este modo de varredura é usado principalmente para a quantificação.

Product Ion (MS2) (Íon Produto): Uma varredura MS/MS completa em que o quadrupolo Q1 é fixo para transmitir um íon precursor específico e o quadrupolo Q3 varre um intervalo de massa definido. Utilizada para identificar todos os produtos de um íon precursor em particular.

Precursor Ion (prec) (Íon Precursor): Uma varredura MS/MS em que o quadrupolo Q3 é fixo em uma proporção massa-carga especificado para transmitir um íon produto específico e o quadrupolo Q1 varre um intervalo de massa. Usada para confirmar a presença de um íon precursor ou mais comumente usada para identificar os compostos que compartilham um íon produto comum.

Neutral Loss (NL) (Perda Neutra): Uma varredura MS/MS em que tanto o quadrupolo Q1 como o quadrupolo Q3 varrem um intervalo de massa, uma massa fixa separada. Uma resposta é observada se o íon escolhido pelo quadrupolo Q1 se fragmenta por perda neutra (a massa fixa) especificada. Usada para confirmar a presença de um íon precursor ou mais comumente usada para identificar os compostos que compartilham uma perda neutra comum.

Sobre Aquisição dos Dados Espectrais

Os dados espectrais podem ser adquiridos em um dos modos descritos na *Tabela 8-1*.

Tabela 8-1 Dados espectrais

Modo	Descrição
Perfil	O valor atual é 0,1 Da. Os dados do perfil são os dados gerados pelo espectrômetro de massas e corresponde à intensidade registrada em uma série de valores de massa discretos uniformemente espaçados. Por exemplo, para um intervalo de massa de 100 Da a 200 Da e um tamanho de incremento de 0,1 Da, o espectrômetro de massas verifica de 99,95 a 100,05 (registrado como valor 100), 100,05 a 101,15 (registrado como valor 101) ... 199,95 a 200,05 (registrado como valor 200).
Salto de Pico	O valor atual é 1,0 Da. O Salto de Pico é um modo de operação de um espectrômetro de massas, em que grandes incrementos (aproximadamente 1 Da) são feitos. Ele tem a vantagem de velocidade (menos incrementos de dados são feitas), mas com a perda de informação com formato do pico.

Parâmetros

Os parâmetros de trabalho são o conjunto de parâmetros do instrumento atualmente utilizados.

- Parâmetros de fonte e gás: (dependente da fonte de íon) estes parâmetros podem mudar dependendo da fonte de íon utilizada.
- Parâmetros de compostos: estes parâmetros consistem principalmente em voltagens do caminho iônico. Os valores ideais para os parâmetros dependentes do composto variam dependendo do composto a ser analisado.
- Parâmetros do detector: estes parâmetros afetam o detector.

A *Figura 8-1* mostra a localização dos parâmetros no caminho óptico iônico.

Figura 8-1 Caminho óptico iônico e Parâmetros

Item	Parâmetro	Tipo de Parâmetro	Uso	Tipo de varredura
1	Voltagem do IonSpray (IS)	Fonte e gás	O parâmetro IS controla a voltagem aplicada ao eletrodo que ioniza a amostra na fonte de íon. Ele depende da polaridade e afeta a estabilidade de pulverização e a sensibilidade. Este parâmetro pode ser dependente do composto e deve ser otimizado para cada composto.	Todos
1	Corrente do Nebulizador (NC)	Fonte e gás	O parâmetro NC controla a corrente aplicada à agulha de descarga corona na sonda de ionização química à pressão atmosférica (APCI). A descarga ioniza as moléculas do solvente, que por sua vez ionizam as moléculas da amostra.	Todos
1	Fonte de íons Gás 1 (GS 1)	Fonte e gás	Para Turbo V™ uma fonte de íon, o parâmetro GS1 controla o gás nebulizador tanto para a sonda TurboIonSpray® como APCI.	Todos
1	Fonte de íons Gás 2 (GS 2)	Fonte e gás	Para Turbo V™ uma fonte de íons, o parâmetro GS2 controla o gás aquecedor para a sonda TurboIonSpray® sonda.	Todos
1	Temperatura (TEM)	Fonte e gás	O parâmetro TEM controla a temperatura do gás aquecedor para a sonda TurboIonSpray ou a temperatura da sonda APCI.	Todos

Item	Parâmetro	Tipo de Parâmetro	Uso	Tipo de varredura
1	Gás de Cortina (CUR)	Fonte e gás	O parâmetro CUR controla o fluxo de gás da interface do Gás de Cortina™interface. A interface do Gás de Cortina situa-se entre a curtain plate e o orifício. Ela evita a contaminação da óptica dos íons.	Todos

Item	Parâmetro	Tipo de Parâmetro	Uso	Tipo de varredura
1	Declustering Potential (DP)	Composto	O parâmetro DP controla a voltagem no orifício, que controla a capacidade de desagrupar íons entre o orifício e a QJet® guia de íons. É utilizado para minimizar os agrupamentos de solventes que possam permanecer nos íons da amostra depois deles entrarem na câmara a vácuo e, se necessário, fragmenta os íons. Quanto maior a voltagem, maior é a energia transmitida para os íons. Se o parâmetro DP for muito alto, pode ocorrer fragmentação indesejada. Use o valor pré-configurado e otimize para o composto.	Todos
2	Potencial de Entrada (EP)	Composto	O parâmetro EP controla a diferença de potencial entre a voltagem no Q0 e no aterramento. O potencial de entrada guia e concentra os íons por meio da alta pressão na região do Q0. Use o valor pré-configurado.	Todos
3	Gás CAD	Fonte e gás	O parâmetro CAD controla a pressão do gás CAD na célula de colisão durante o Q3, tipo MS/MS e . Para varreduras Q3, o gás de colisão ajuda a concentrar os íons conforme passam por meio da célula de colisão Q2. O valor pré-definido para o parâmetro CAD está em modo fixo. Para os tipos de varredura MS/MS, o gás CAD ajuda a fragmentar os íons precursores. Quando os íons precursores colidem com o gás de colisão, eles se dissociam para formar íons produto. Use o valor pré-configurado e otimize para o composto.	Q3 MI, Q3 MS, MRM, Prec, NL

Item	Parâmetro	Tipo de Parâmetro	Uso	Tipo de varredura
3	Energia de colisão (CE)	Composto	O parâmetro CE controla a diferença de potencial entre a região do Q0 e a célula de colisão Q2. Ele é usado somente em tipos de varredura MS/MS. Este parâmetro é a quantidade de energia que os íons precursores recebem conforme eles são acelerados dentro da célula de colisão Q2, onde colidem com as moléculas de gás e se fragmentam. Use o valor pré-configurado e otimize para o composto.	MRM, MS2, Prec, NL
3	Potencial de Saída da Célula de Colisão (CXP)	Composto	O parâmetro CXP só é utilizado em tipos de varredura MS/MS e Q3, onde ele transmite os íons ao quadrupolo Q3. Use o valor pré-configurado e otimize para o composto.	Q3, MRM, MS2, Prec e NL
4	CEM (CEM)	Detector	O parâmetro CEM controla a voltagem aplicada ao detector. O parâmetro CEM controla a voltagem aplicada ao detector.	Todos

Instruções de Operação - Listas 9

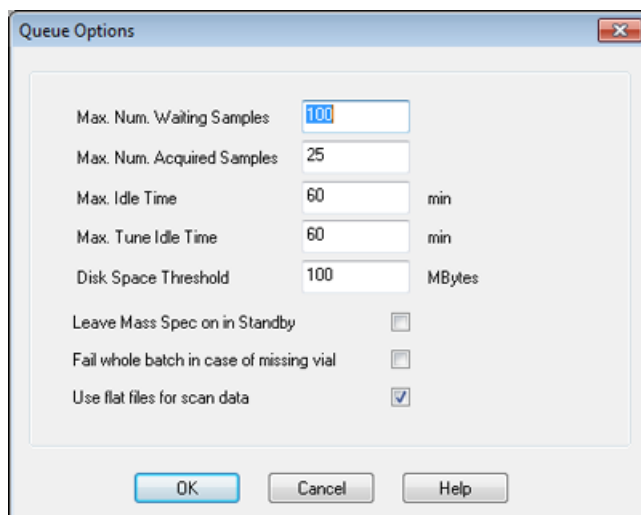
Uma lista é um conjunto de informações sobre as amostras a serem analisadas. As listas relatam ao software a ordem em que para analisar as amostras. Para informações sobre importação de listas, consulte o *Guia Avançado do Usuário*.

Configurar as Opções de Espera

A espera segue de um em um pela lista, adquirindo cada amostra com o método de aquisição selecionado. Após a aquisição de todas as amostras, a espera para e o espectrômetro de massas entre no modo **Standby** (Em Espera). No modo **Standby** (Em Espera), o LC bombeia e algumas voltagens do instrumento são desligadas.

O usuário pode mudar a duração de tempo que a espera funciona após o término da última aquisição, antes de o software Analyst® colocar o espectrômetro de massas no modo **Standby** (Em Espera). Para informações sobre outros campos na caixa de diálogo **Queue Options** (Opções de Fila), consulte a Ajuda.

1. Na barra de Navegação, clique em **Configure** (Configurar).
2. Clique em **Tools (Ferramentas)** > **Settings (Configurações)** > **Queue Options (Opções de Fila).**

Figura 9-1 Caixa de Diálogo das Opções de Fila

3. No campo **Max. Num. Waiting Samples** (Núm. Máx. de Amostras em Espera), configure o número máximo de amostras em um valor que seja maior ao número de amostras que serão submetidas à espera

4. No campo **Max. Idle Time** (Tempo Máx. de Ociosidade), digite o período de tempo que a espera irá aguardar após a conclusão da aquisição antes de entrar em modo **Standby** (Em Espera). O valor atual é 60 minutos.

   Se os cilindros de gás forem utilizados, então ajuste este tempo para garantir que o gás no cilindro não acabe.

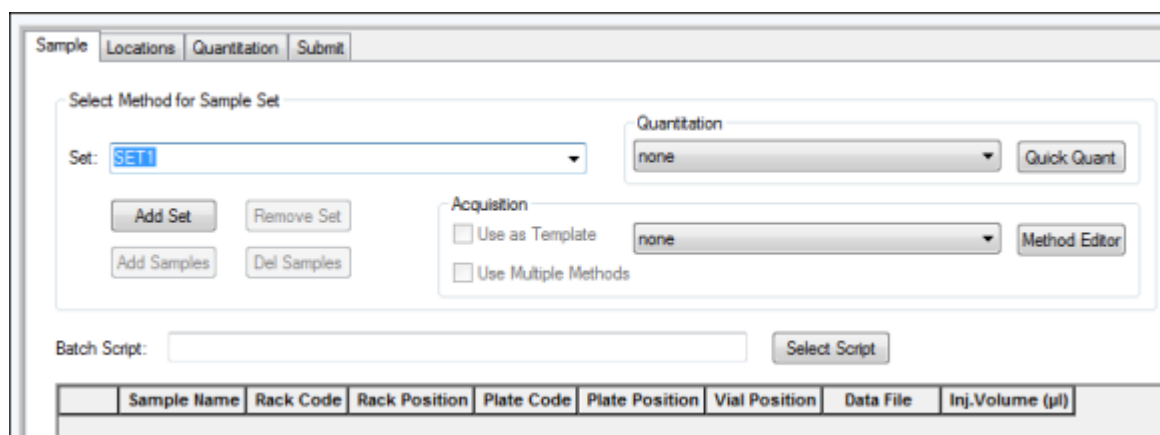
   Se um método LC estiver sendo usado, logo antes de iniciar a corrida, tenha certeza de que há solvente suficiente nos reservatórios de todas as corridas de amostras no taxa de vazão primária e o tempo inativo máximo.
5. Selecione a caixa de verificação **Leave Mass Spec on in Standby** (Deixar Espec. de Massas em Espera) para manter o espectrômetro de massas funcionando após a conclusão da análise. Esta função permite que os aquecedores e o gases continuem funcionando, mesmo após o dispositivo ter entrado no estado **Idle** (Ocioso), de forma que a fonte de íons e a entrada no espectrômetro de massas sejam mantidas livres de contaminantes.
6. Selecione a caixa de verificação **Fail Whole Batch in Case of Missing Vial (Falhar toda a lista em caso de frasco faltante)** para falhar toda lista quando for encontrado um frasco faltante. Se esta opção não estiver selecionada, então apenas a amostra atual irá falhar e a espera continuará para a próxima amostra.

Adicionar Conjuntos e Amostras a Listas

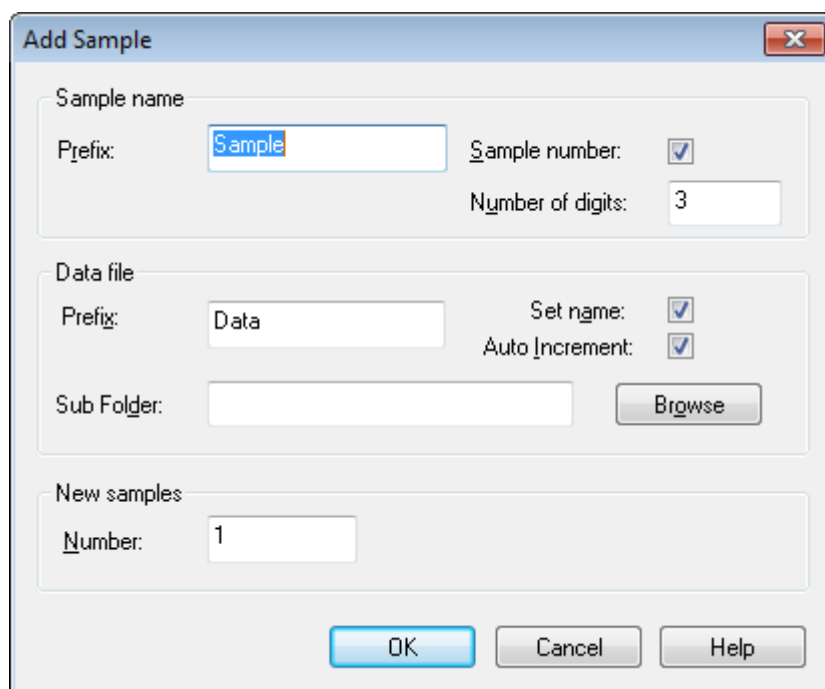
Um conjunto pode consistir em uma única amostra ou múltiplas amostras.

Nota: Para saber mais sobre como adicionar informações de quantificação a uma lista, consulte o *Guia Avançado do Usuário*.

1. Na barra de Navegação, em **Acquire (Adquirir)**, clique duas vezes em **Build Acquisition Batch (Criar Lista de Aquisição)**.

Figura 9-2 Caixa de diálogo Batch Editor (Editor de Lista)

2. Na aba **Sample (Amostra)**, da lista **Set (Conjunto)**, digite um nome.

3. Clique em **Add Set (Adicionar Conjunto)**.
4. Clique em**Add Samples (Adicionar Amostras)** para adicionar amostras para um novo conjunto.

Figura 9-3 Caixa de diálogo Adicionar Amostra

5. Na seção **Sample name (Nome da amostra)**, no campo **Prefix (Prefixo)**, digite um nome para as amostras neste conjunto.
6. Para adicionar numeração incremental ao final do nome da amostra, marque a caixa de seleção **Sample number (Número da amostra)**.
7. Se a caixa de seleção **Sample number (Número da amostra)** estiver selecionada, então, em **Number of digits (Número de dígitos)**, digite o número de dígitos a serem incluídos no nome da amostra.

   Por exemplo, se 3 for digitado, então, os nomes da amostra seriam nomedaamostra001, nomedaamostra002 e nomedaamostra003.
8. Na seção **Data file (Arquivo de dados)**, em **Prefix (Prefixo)**, digite um nome para o arquivo de dados que irá armazenar as informações da amostra.
9. Marque a caixa de seleção **Set name (Nome do conjunto)** para usar o nome do conjunto como parte do nome do arquivo de dados.
10. Marque a caixa de seleção **Auto Increment (Incremento Automático)** para incrementar os nomes de arquivo de dados automaticamente.

Nota: Os dados para cada amostra podem ser armazenados no mesmo arquivo de dados ou em arquivos separados. Os nomes de arquivo de dados terão sufixos numéricos a partir de 1.

11. Digite um nome no campo **Sub Folder (Subpasta)**.

    A pasta está armazenada na pasta **Data (Dados)** para o projeto atual. Se o campo **Sub Folder (Subpasta)** for deixado em branco, então, o arquivo de dados é armazenado na pasta **Data (Dados)** e não será criada uma subpasta.

12. Na seção **New Samples (Novas amostras)**, no campo **Number (Número)**, digite o número de novas amostras.

13. Clique em **OK**.

    A tabela de amostra é preenchida com os nomes da amostra e nomes de arquivo de dados.

    Dica! As opções **Fill Down (Preencher)** e **Auto Increment (Incrementar Automaticamente)** estão disponíveis no menu do botão direito depois de selecionar um cabeçalho de coluna única ou várias linhas em uma coluna.

14. Na aba **Sample (Amostra)**, na seção **Acquisition (Aquisição)**, selecione um método da lista.

    Dependendo de como o sistema está configurado, informações específicas para o autoamostrador devem ser inseridas. Mesmo se o volume de injeção for definido no método, o usuário pode alterar o volume de injeção para uma ou mais amostras, alterando o valor na coluna de volume de injeção.

    Nota: Para usar métodos diferentes para algumas das amostras neste conjunto, marque a caixa de seleção **Use Multiple Methods (Usar múltiplos métodos)**. A coluna **Acquisition Method (Método de Aquisição)** é mostrada na tabela **Sample (Amostra)**. Selecione o método de aquisição para cada amostra nesta coluna.

15. Para alterar os volumes de injeção daqueles volumes constantes no método, na coluna **Inj. Volume (µL)** (Volume de Inj.), digite o volume de injeção para cada amostra.

16. Indique as posições dos frascos na coluna **Vial Position (Posição do Frasco)**.

    Nota: Para preencher automaticamente as amostras da aba **Locations (Localizações)**, clique no primeiro e no último frasco dentro de um conjunto enquanto pressiona a tecla **Shift**. Esses frascos aparecem como círculos vermelhos. Na aba **Locations (Localizações)**, injeções múltiplas do mesmo frasco podem ser feitas pressionando a tecla **Ctrl** enquanto clica na localização do frasco. O círculo vermelho fica verde.

17. (Opcional) Use os procedimentos na *Tabela 9-1* conforme necessário.

Tabela 9-1 Dicas para o Editor de Lista

Para fazer isto...	**...faça isso**
Para alterar todos os valores em uma coluna simultaneamente	clique no cabeçalho de uma coluna e, em seguida, clique com o botão direito. A partir do menu, use os comandos **Auto Increment (Incrementar Automaticamente)** e **Fill Down (Preencher)** para alterar os valores na coluna. Isso também funciona para múltiplas células na mesma coluna.
Para alterar um método de aquisição existente	Selecione o método e, em seguida, clique em**Method Editor (Editor do Método)** a partir da lista. Parar criar um novo método de aquisição, selecione **None (Nenhum)** a partir da lista e, em seguida, clique em **Method Editor (Editor do Método)**. Somente usuários experientes devem usar este atributo. Não use este atributo se a opção **Use Multiple Methods (Usar Múltiplos Métodos)** estiver selecionada.
Para aplicar um método de quantificação criado anteriormente	selecione o método a partir da lista **Quantitation (Quantificação)**.
Para selecionar mais de um poço ou frasco ao mesmo tempo	segure a tecla **Shift** e, em seguida, clique no primeiro e no último poço ou frasco no intervalo.

18. Para definir as localizações da amostra, faça um dos seguintes:
    - *Configurar os Locais da Amostra no Editor de Lista na página 79*
    - *Selecionar as Posições do Frasco usando a Aba Locais (Opcional) na página 79*
19. Clique na aba **Submit (Enviar)**.
20. Se a seção **Submit Status (Status de Envio)** tiver uma mensagem sobre o status da lista, então, proceda uma das ações a seguir:
    - Se a mensagem indicar que a lista está pronta para envio, então, vá para o passo 21.
    - Se a mensagem indicar que a lista não está pronta para envio, então, faça as alterações conforme indicado pela mensagem.
21. Clique em **Submit (Enviar)**.

    A caixa de diálogo **Acquisition (Aquisição)** abre.
22. Salve o arquivo.

Submeter uma Amostra ou Conjunto de Amostras

1. Clique em **Submit** (Enviar) no **Batch Editor** (Editor de Lista).
2. Se a seção **Submit Status** (Status de Envio) contém uma mensagem sobre o estado da lista, então faça o seguinte:
    - Se a mensagem indicar que a lista está pronta para envio, proceda para a etapa *3*.
    - Se a mensagem indicar que a lista não está pronta para envio, então, faça as alterações conforme indicado pela mensagem.
3. Clique em **Submit** (Enviar).
4. Salve o arquivo.

Mudança da Ordem da Amostra

A ordem das amostras pode ser editada antes de serem submetidas à **Queue** (Fila).

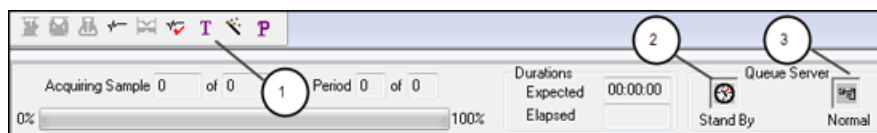
- Na aba **Submit** (Enviar), clique duas vezes em qualquer número na parte mais à esquerda da tabela (uma caixa muito discreta é visível) e então arraste-o para o novo local.

Adquirir dados

O sistema não deve estar no modo **Tune and Calibrate (Ajustar e Calibrar)** quando a aquisição da amostra for iniciada. Além disso, se o sistema foi executado anteriormente naquele dia e ainda não foi definido para o modo **Standby (Em Espera)** então a aquisição de amostras iniciará automaticamente.

1. Na barra de Navegação, clique em **Acquire (Adquirir)**.
2. Clique em **View (Visualizar)** > **Sample Queue (Amostra em Espera).**

    O **Queue Manager (Gerenciamento de Espera)** abre com todas as amostras apresentadas.

    Figura 9-4 Gerenciamento de Espera

Item	Descrição
1	O ícone **Reserve Instrument for Tuning (Reservar Instrumento para Ajuste)** não deve ser pressionado.
2	O status em Espera deve estar no modo **Stand by (Em Espera)**.
3	O Servidor em Espera deve estar no modo **Normal**. Consulte *Estados em Espera na página 83*.

3. Clique em **Acquire (Adquirir) > Start Sample (Iniciar amostra).**

Nota: O fabricante recomenda que a amostra seja executada novamente se uma finalização anormal ocorrer durante a aquisição de amostras.

Configurar os Locais da Amostra no Editor de Lista

Se um autoamostrador for usado no método de aquisição, então as posições dos frascos das amostras devem ser definidas na lista de aquisição. Defina o local na aba **Sample** (Amostras) ou na aba **Locations** (Locais). Para mais informações sobre criar listas, consulte *Adicionar Conjuntos e Amostras a Listas na página 74*.

Nota: Dependendo do autoamostrador sendo usado, pode não ser necessário digitar os detalhes nas colunas adicionais.

1. Na aba **Sample** (Amostra), da lista **Set** (Configuração), selecione o conjunto.
2. Para cada amostra na configuração, faça o seguinte, se aplicável:
   - Na coluna **Rack Code** (Código da Bandeja), selecione o tipo de bandeja.
   - Na coluna **Rack Position** (Posição na Bandeja), selecione a posição na bandeja no autoamostrador.
   - Na coluna **Plate Code** (Código da Placa), selecione o tipo de placa.
   - Na coluna **Plate Position** (Posição na Placa), selecione a posição da placa na bandeja.
   - Na coluna **Vial Position** (Posição do Frasco), digite a posição do frasco na placa ou bandeja.
3. Salve o arquivo.

Selecionar as Posições do Frasco usando a Aba Locais (Opcional)

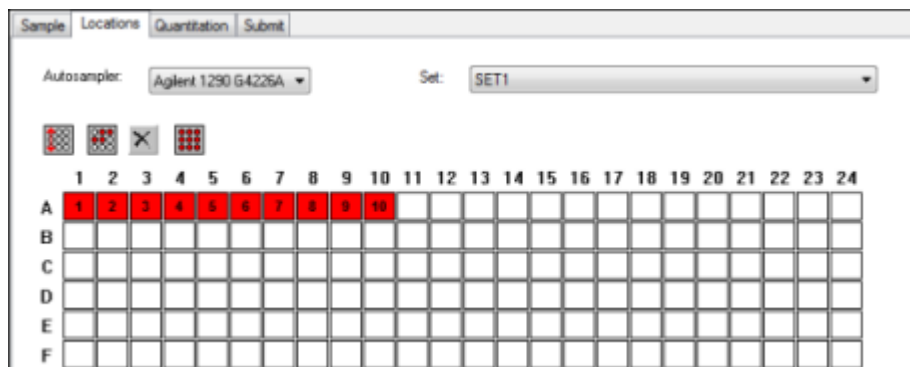
1. Clique na aba **Locations** (Locais) no **Batch Editor** (Editor de Lista).
2. Selecione o conjunto da lista **Set** (Conjunto).
3. Selecione o autoamostrador a partir da lista **Autosampler** (Autoamostrador).

   O número apropriado de espaços na bandeja para o autoamostrador é mostrado na visualização gráfica da estante.
4. No espaço associado com a bandeja, clique duas vezes e depois selecione o tipo de bandeja.

   As placas ou bandejas são mostradas.

5. Clique duas vezes em um dos retângulos.

   Os círculos retratando os poços ou frascos para a placa ou bandeja são mostrados.

Figura 9-5 Aba Locais

6. Para selecionar quais amostras são marcadas por lista ou coluna, clique o botão seletor **Row/Column selection** (Seleção de Linha/Coluna).

   Se o botão mostrar uma linha horizontal, então o **Batch Editor** (Editor de Lista) marca as amostras por linha. Se o botão mostrar uma linha vertical, então o **Batch Editor** (Editor de Lista) marca as amostras por coluna.

7. Clique nos poços ou frascos de amostra na ordem a serem analisados. Clique um poço ou frasco selecionado novamente para limpá-lo.

8. Salve o arquivo.

Dica! Para autopreencher as amostras, pressione a tecla **Shift** enquanto clica no primeiro e último frasco dentro de um conjunto. Pra realizar múltiplas injeções a partir do mesmo frasco, pressione a tecla **Ctrl** enquanto clica no local do frasco. O círculo vermelho muda para um círculo verde.

Configurar os Detalhes de Quantificação no Editor de Lista (Opcional)

Se um método de quantificação for usado com uma lista e se o usuário não quiser selecionar os detalhes de quantificação após a aquisição, então defina os detalhes de quantificação antes de submeter uma lista.

As colunas apropriadas **Internal Standard** (Padrão Interno) e **Standard** (Padrão) são mostradas na aba **Quantitation** (Quantificação) de acordo com o método selecionado na aba **Sample** (Amostra).

1. Com o arquivo do lista aberta na janela **Batch Editor (Editor de Lista)**, clique na aba **Quantitation (Quantificação)**.
2. Selecione o conjunto contendo as amostras.
3. Selecione um **Quant Type** (Tipo de Quantif.) para todas as amostras da lista na célula.
4. Se aplicável, digite a concentração de pico na coluna **Analyte (Analito)**.

5. Se aplicável, digite o **Internal Standard (Padrão interno)**.
6. Repita este procedimento para cada conjunto na lista.
7. Salve o arquivo.

Nota: A ordem das amostras pode ser editada antes de que elas sejam submetidas à espera. Para mudar a ordem da amostra, na aba **Submit** (Enviar), clique duas vezes em qualquer número na parte mais à esquerda da tabela (uma caixa muito discreta é mostrada) e então arraste-o para o novo local.

Parar a Aquisição da Amostra

Quando a aquisição da amostra é interrompida, a varredura do fluxo termina antes da aquisição ser interrompida.

1. No **Queue Manager (Gerenciamento de Espera)**, clique na amostra em espera após o ponto em que a aquisição deve ser interrompida.
2. Na barra de Navegação, clique em **Acquire (Adquirir)**.
3. Clique em **Acquire (Adquirir) > Stop Sample (Parar Amostra).**

   A espera para após a varredura atual na amostra selecionada ser concluída. O status da amostra na janela **Queue Manager (Local) (Gerenciamento em Espera)** muda para **Terminated (Terminado)** e todas as outras amostras seguintes em espera estão **Waiting (Aguardando)**.
4. Para continuar processando a lista, clique em **Acquire (Adquirir) > Start Sample (Iniciar Amostra).**

Importar e Submeter Arquivos da Lista

Os usuários podem exportar um arquivo de texto contendo informações do lote ao invés de criar uma lista no **Batch Editor** (Editor de Lista). Se todos os detalhes da amostra estiverem na planilha, então é mais rápido rearranjar e importar os dados na planilha do que digitar manualmente os dados no **Batch Editor** (Editor de Lista).

Antes de importar informações da lista de um arquivo de texto, tenha certeza de que os dados no arquivo estão organizados e formatados de forma correta. Particularmente, as leituras da coluna na planilha devem corresponder às leituras de coluna no **Batch Editor** (Editor de Lista).

Criar uma Lista como um Arquivo de Texto

Para certificar-se que o arquivo de texto inclui leituras adequadas, crie uma lista utilizando o **Batch Editor (Editor de Lote)**, exporte-o como um arquivo de texto, digite os valores apropriados em um editor de planilha e, em seguida, importe o arquivo de volta para o **Batch Editor (Editor de Lista)**. Os usuários podem exportar uma lista só apenas ele contiver pelo menos um conjunto com pelo menos uma amostra. O arquivo de texto salvo pode ser usado mais tarde como um modelo.

1. Certifique-se de que o perfil de hardware ativo inclui todos os dispositivos a serem utilizados para a adquirir as amostras.
2. No **Batch Editor (Editor de Lista)**, crie um conjunto simples, lista de amostra simples.
3. Clique em **File (Arquivo) > Export (Exportar).**

   A caixa de diálogo **Salvar Como** abre.
4. Digite um nome para o arquivo de texto no campo **File name (Nome do Arquivo)** e em seguida clique em **Save (Salvar)**.
5. Abra o arquivo de texto em um programa de planilhas como o Microsoft Excel.
6. Digite, ou copie e cole, os detalhes para as amostras: uma amostra por linha, com os detalhes em leituras adequadas.

   Nota: Não exclua nenhuma das colunas. As colunas na planilha devem corresponder às colunas no **Batch Editor (Editor de Lista)**.
7. Salve o arquivo de texto modificado como arquivo de texto .txt ou .csv e então feche o programa de planilha.

   O arquivo de texto agora está pronto para ser importado ao **Batch Editor (Editor de Lista)**.

Importe uma Lista como um Arquivo de Texto

1. No **Batch Editor** (Editor de Lista), na aba **Sample** (Amostra), clique com o botão direito e depois clique em **Import From (Importar de) > File (Arquivo).**

   A caixa de diálogo **Open** (Abrir) abre.
2. clique no arquivo de texto necessário e então clique em **Open** (Abrir).

   Se um autoamostrador estiver sendo usado, então a caixa de diálogo **Select Autosampler** (selecionar Autoamostrador) abre.

   Nota: Se o arquivo de texto salvo não estiver visível na lista de **Files of type** (Arquivos do tipo), então selecione **Microsoft Text Driver (*.txt; *.csv)**. Os arquivos com a extensão .txt são mostradas no campo.
3. Na lista do autoamostrador, selecione o autoamostrador e então clique em **OK**.

   A tabela de amostra se preenche com os detalhes do arquivo de texto.
4. Submeta a lista.

Menu do Editor de Lista

Clique com o botão direito na tabela **Batch Editor (Editor de Lista)** para acessar as opções.

Menu	Função
Abrir	Abra um arquivo de lista.
Importar de	Importa um arquivo.
Salvar como Lista	Salvar a lista com um nome diferente.
Salvar como Modelo	Salvar a lista como um modelo. Usado com o atributo Express View (Visualização Expressa).
Ocultar/Exibir Coluna	Oculta ou mostra uma coluna.
Salvar Configurações da Coluna	Salva as configurações da coluna da lista.
Adicionar Coluna Personalizada	Adiciona uma coluna personalizada.
Excluir Coluna Personalizada	Exclui uma coluna personalizada.
Preencher	Copia o mesmo dado nas células selecionadas.
AutoIncrement	Incrementa automaticamente o mesmo dado nas células selecionadas.
Excluir Amostras	Exclui a linha selecionada.
Selecionar autoamostrador	Seleciona um autoamostrador.

Condições de Espera e Status do Dispositivo

O **Queue Manager** (Gerenciamento de Espera) mostra a condição da espera, lista e amostra. Informações detalhadas sobre uma amostra em particular em espera também podem ser visualizadas.

Estados em Espera

O estado atual de espera é indicado no **Queue Server (Servidor em Espera)**.

Figura 9-6 Indicador do Servidor em Espera Mostrando Modo Normal

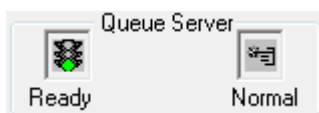
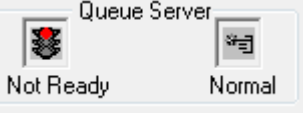
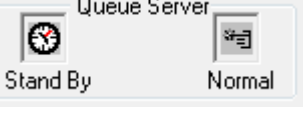
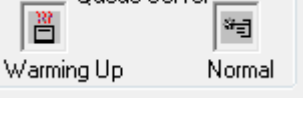
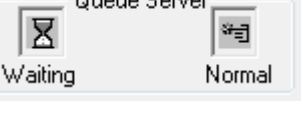
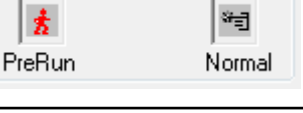
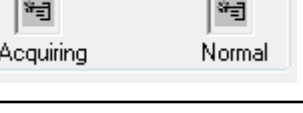
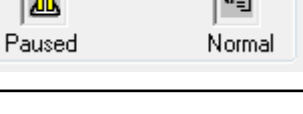



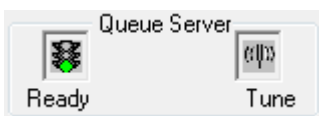
Figura 9-7 Indicador do Servidor em Espera Mostrando Modo de Ajuste

O primeiro ícone indica o estado de espera. O segundo ícone indica se a espera está no modo **Tune (Ajustar)** (para ajuste) ou modo **Normal** (para amostras em execução). A *Tabela 9-2* descreve os ícones e os estados de espera.

Tabela 9-2 Estados em Espera

Ícones	Estado	Definição
Queue Server Not Ready Normal	Não Pronto	O perfil de hardware é desativado e a espera não está aceitando quaisquer submissões de amostra.
Queue Server Stand By Normal	Standby	O perfil do hardware foi ativado, mas todos os dispositivos estão inativos. As bombas não estão em execução e os gases estão desligados.
Queue Server Warming Up Normal	Aquecendo	O espectrômetro de massas e os dispositivos estão equilibrando, as colunas estão sendo condicionadas, a agulha do autoamostrador está sendo lavada e os fornos de coluna estão atingindo a temperatura. A duração do equilíbrio é selecionada pelo operador. A partir deste estado, o sistema pode ir para o estado **Ready (Pronto)**.
Queue Server Ready Normal	Pronto	O sistema está pronto para começar a executar as amostras e os dispositivos foram equilibrados e estão prontos para serem executados. Neste estado, a espera pode receber amostras e executará depois que as amostras forem enviadas.
Queue Server Waiting Normal	Aguardando	O sistema começará automaticamente a aquisição quando a próxima amostra for enviada.
Queue Server PreRun Normal	PreRun	O método está sendo baixado para cada dispositivo e o equilíbrio do dispositivo está ocorrendo. Este estado ocorre antes da aquisição de cada amostra em uma lista.
Queue Server Acquiring Normal	Aquisição	O método é executado e a aquisição de dados ocorre.
Queue Server Paused Normal	Pausado	O sistema foi pausado durante a aquisição.

Visualizar os Ícones do Instrumento e Status do Dispositivo

Os ícones representando o espectrômetro de massas e cada dispositivo na configuração do hardware ativo são mostrados na barra de status no canto inferior direito da janela. O usuário pode visualizar o status detalhado de uma bomba LC para determinar se a pressão da bomba LC é apropriada ou visualizar o status detalhado do espectrômetro de massas para confirmar a temperatura da fonte de íons.

Nota: Para cada status, a cor de fundo pode ser vermelha. Um fundo vermelho indica que o dispositivo encontrou um erro durante aquele estado.

- Na barra de status, clique duas vezes no ícone para o dispositivo ou espectrômetro de massas.

  A caixa de diálogo **Instrument Status** (Status do Instrumento) abre.

Tabela 9-3 Ícones do Instrumento e Status do Dispositivo

Status	Ícone	Cor de Fundo	Descrição
Inativo		Verde ou amarela	O dispositivo não está funcionando. Se a cor de fundo for amarela, então o dispositivo deve ser equilibrado antes de estar pronto para funcionar. Se a cor de fundo for verde, o dispositivo está pronto para funcionar.
Equilibrando		Verde ou amarela	O dispositivo está equilibrando.
Aguardando		Verde	O dispositivo está aguardando por um comando do software ou outro dispositivo ou por alguma ação do operador.
Funcionando		Verde	O dispositivo está analisando uma lista.
Abortando		Verde	O dispositivo está abortando uma análise.
Baixando		Verde	Um método está sendo transferido para o dispositivo.
Pronto		Verde	O dispositivo não está funcionando, mas está pronto para a análise.
Erro		Vermelho	O dispositivo encontrou um erro que deve ser investigado.

Menu de Espera

Clique com o botão direito na tabela **Queue** (Fila) para acessar as opções.

Menu	Função
Detalhes da Amostra	Abre a caixa de diálogo **Sample Details** (Detalhes da Amostra).
Readquirir	Adquire uma amostra de novo.
Inserir Pausa	Insere uma pausa, em segundos, entre duas amostras.
Excluir	Exclui a lista ou as amostras selecionadas.
Mover Lista	Move a lista dentro da espera.
Ordenar	Ordena pela coluna pré-selecionada.
Configurações da Coluna	Muda as configurações da coluna.

Instruções de operação – Analisar e Processar Dados 10

Utilize os arquivos de amostra instalados na pasta **Example (Exemplo)** para aprender como visualizar e analisar dados usando a análise mais comum e ferramentas de processamento. Para mais informações sobre os seguintes tópicos, consulte o *Guia Avançado do Usuário*.

- Gráficos de rotulagem
- Sobrepor ou somar espectros ou cromatogramas
- Subtração da linha de base
- Algoritmos smooth (suavização)
- Trabalhando com dados suavizados
- Trabalhando com dados de centroide
- Trabalhando com gráficos de contorno
- Trabalhando com a ferramenta de interpretação do fragmento
- Trabalhando com bancos de dados e registros da biblioteca

Abrir o Arquivo de Dados

Dica! Para desligar a atualização automática no espectro de massas, clique com o botão direito no espectro de massas e então clique em **Show Last Scan** (Mostrar Última Varredura). Se houver uma marca verificada ao lado de **Show Last Scan** (Mostrar Última Varredura), então o espectro irá atualizar em tempo real.

1. Na barra de navegação, em **Explore** (Explorar), clique duas vezes em **Open Data File** (Abrir Arquivo de Dados).
2. Na lista **Data Files** (Arquivos de Dados), navegue ao arquivo de dados para abrir, selecione uma amostra e então clique em **OK**.

   A caixa de diálogo **Select Sample** (Selecionar Amostra) abre. Os dados adquiridos da amostra são mostrados. Se os dados ainda estiverem sendo adquiridos, então o espectro de massa, traço DAD/UV e TIC continuam a atualizar automaticamente.

Navegar Entre as Amostras em um Arquivo de Dados

Nota: A *Tabela E-5 na página 154* mostra os ícones de navegação utilizados neste procedimento. Se as amostras forem salvas em arquivos de dados separados, então abra cada arquivo individualmente.

- Abra o arquivo de dados e, então, faça um dos seguintes:
  - Clique no ícone com a seta apontando para a direita para pular para a próxima amostra no arquivo de dados.
  - Clique no ícone com a seta curvando para a direita para pular para uma amostra não sequencial.
  - Na caixa de diálogo **Select Sample** (Selecionar Amostra), da lista **Sample** (Amostra), selecione a amostra.
  - Clique no ícone com a seta apontando para a esquerda para ir para a mostra anterior no arquivo de dados.

Mostrar as Condições Experimentais

As condições experimentais usadas para coletar os dados são armazenadas no arquivo de dados com os resultados. A informação contém detalhes do método de aquisição utilizado: o método de aquisição MS (ou seja, o número de períodos, experimentos e ciclos) incluindo os parâmetros do instrumento e o método do dispositivo de HPLC (taxa de vazão da bomba LC). Ainda, também contém a resolução e as tabelas de calibração da massa para MS usadas para a aquisição da amostra. A *Tabela 10-1* mostra a funcionalidade do software disponível quando o usuário visualiza a informação no arquivo.

- Clique em **Explore (Explorar) > Show (Mostrar) > Show File Information (Mostrar Informações do Arquivo).**

  O painel **File Information** (Informações do Arquivo) abre abaixo do gráfico.

  Dica! Para criar um método de aquisição a partir do painel **File Information** (Informações do Arquivo), clique com o botão direito no painel **File Information** (Informações do Arquivo) e depois clique em **Save Acquisition Method** (Salvar o Método de Aquisição).

Tabela 10-1 Clique com Botão Direito no Menu para Mostrar o Painel de Informações do Arquivo

Menu	Função
Copiar	Copia os dados selecionados.
Colar	Cola os dados.
Selecionar Tudo	Seleciona todos os dados no painel.

Tabela 10-1 Clique com Botão Direito no Menu para Mostrar o Painel de Informações do Arquivo (continuação)

Menu	Função
Salvar no Arquivo	Salva os dados como um arquivo .rtf.
Fonte	Muda a fonte.
Salvar o Método de Aquisição	Salva o método de aquisição como um arquivo .dam.
Salvar o Método de Aquisição no CompoundDB	Abre a caixa de diálogo **Specify Compound Information** (Especificar Informações do Composto). Selecione os **IDs** e os pesos moleculares a serem salvos no banco de dados do composto.
Excluir Painel	Exclui o painel selecionado.

Mostrar os Dados em Tabelas

1. Abra um arquivo de dados.
2. Clique em **Explore (Explorar)** > **Show (Mostrar)** > **Show List Data (Mostrar Dados da Lista)** .

   Os dados são mostrados em um painel abaixo do gráfico.

Figura 10-1 Aba Peak List (Lista de Picos)

	m/z (Da)	Centroid mass (Da)	Resolution	Intensity (cps)	Peak area (counts)	Charges	Peak start (Da)	Peak end (Da)	Width (Da)	% Intensity	% Centroid
1	57.1693	57.0887	85.9625	8.1076e6	5.0642e7	Undefined	56.5672	57.4704	0.6641	25.4540	50.0000
2	58.0726	58.0901	Undefined	4.5920e5	1.2688e6	Undefined	57.5708	58.2733	Undefined	1.4417	83.7544
3	59.1765	59.0717	83.0227	3.1852e7	2.1693e8	Undefined	58.4740	59.4776	0.7115	100.0000	50.0000
4	60.0798	60.0668	89.1772	1.6240e6	6.1594e6	Undefined	59.5780	60.4812	0.6736	5.0986	50.0000
5	173.0500	173.0187	239.3394	2.5236e6	1.7223e7	Undefined	172.4471	173.4520	0.7229	7.9229	50.0000
6	174.0549	174.0474	Undefined	4.4680e5	2.1078e6	Undefined	173.5525	174.2559	Undefined	1.4027	87.9812
7	174.9593	175.0612	237.1904	2.4469e7	1.7168e8	Undefined	174.5573	175.5617	0.7381	76.8215	50.0000
8	176.0635	176.1104	262.3466	2.6356e6	1.4569e7	1	175.6620	176.4650	0.6713	8.2745	50.0000
9	177.0672	177.0476	265.6308	7.2800e5	4.0984e6	1	176.5654	177.4687	0.6665	2.2856	50.0000
10	612.4245	612.4245	Undefined	3.8320e5	1.3760e6	Undefined	612.4245	613.0306	Undefined	1.2031	100.0000
11	614.4450	614.3404	696.0333	4.3380e5	3.3590e6	Undefined	613.7379	614.8491	0.8826	1.3619	50.0000
12	616.3644	616.3409	843.5254	1.3294e6	9.4090e6	1	615.7583	616.8652	0.7307	4.1737	50.0000
13	617.3641	617.3607	Undefined	4.7720e5	3.1644e6	1	616.8652	617.9627	Undefined	1.4982	54.7360
14	619.4594	619.4607	Undefined	9.0480e5	7.4368e6	Undefined	617.9627	619.5591	Undefined	2.8406	94.3744
15	904.5495	904.5497	1112.6356	4.1820e5	3.1972e6	Undefined	903.9424	905.1566	0.8130	1.3129	50.0000

Tabela 10-2 Clique com o botão direito em Menu para ver a aba Lista de Picos Espectrais.

Menu	Função
Opções da Coluna	Abre a caixa de diálogo **Select Columns for Peak List (Selecionar as Colunas para Lista de Picos)**.
Salvar como texto	Salva os dados como um arquivo .txt.
Excluir Painel	Exclui o painel selecionado.

Tabela 10-3 Clique com o botão direito em Menu para ver a aba da Lista de Picos Cromatográficos

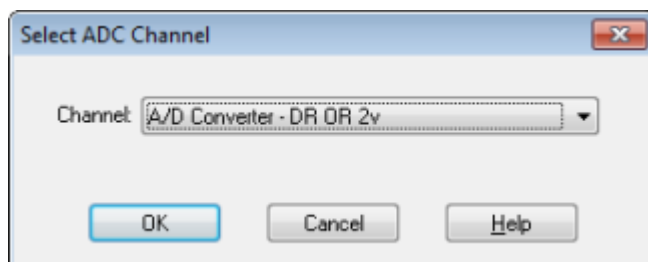
Menu	Função
Mostrar Picos no Gráfico	Mostra os picos em duas cores no gráfico.
Parâmetros IntelliQuan	Abra a caixa de diálogo **IntelliQuan**
Salvar como texto	Salva os dados como um arquivo .txt.
Excluir Painel	Exclui o painel selecionado.

Mostrar os dados ADC

Os dados do conversor analógico-digital (ADC) são adquiridos a partir de um detector secundário (por exemplo, de um detector de UV por meio de um cartão de ADC) e é útil para a comparação com os dados de espectrometria de massas. Para disponibilizar os dados ADC, obtenha os dados e os dados do espectrômetro de massas simultaneamente e salve os dois no mesmo arquivo.

1. Abrir um arquivo de dados que contém os dados do ADC.
2. Clique em **Explore (Explorar) > Show (Mostrar) > Show TIC (Mostrar TIC).**

   A caixa de diálogo **Select ADC Channel (Selecionar Canal ADC)** abre.

   Figura 10-2 Caixa de diálogo Selecionar Canal ADC

3. A partir da lista **Channel (Canal)** selecione um canal.
4. Clique em **OK**.

   Os dados ADC são abertos em um novo painel abaixo do painel ativo.

Mostrar os Dados Quantitativos Básicos

1. Abra um arquivo de dados.
2. Clique em **Explore > Show > Show List Data** (Explorar > Mostrar > Mostrar Lista de Dados).
3. Na lista **Peak List** (Lista de Picos), clique com o botão direito e então selecione **Show Peaks in Graph** (Mostrar Picos no Gráfico).

   Os picos são mostrados em duas cores.

4. Para mudar as configurações do algoritmo de integração do pico, clique com o botão direito e então selecione **Analyst Classic Parameters** (Parâmetros Clássicos do Analyst) ou **Intelliquan Parameters** (Parâmetros IntelliQuan), o que estiver ativo.
5. (Opcional) Para remover os picos coloridos, clique com o botão direito na aba **Peak List** (Lista de Picos) e depois desmarque **Show Peaks in Graph** (Mostrar Picos no Gráfico).

Cromatograma

Consulte a *Tabela 10-8 na página 101* para mais informações sobre a utilização dos ícones disponíveis.

Tabela 10-4 Tipos de Cromatogramas

Tipos de Cromatogramas	Finalidade
TIC (Cromatograma de íons totais)	Uma visão cromatográfica gerada pelo gráfico da intensidade de todos os íons em uma varredura contra o tempo ou o número de scans. Quando um arquivo de dados é aberto, ele está pré-definido para abrir como um TIC. Se o experimento contém apenas um scan, então é mostrado como um espectro. Se a caixa de seleção **MCA** for selecionada durante a aquisição do arquivo de dados, o arquivo de dados abre para o espectro de massa. Se a caixa de seleção **MCA** não estiver selecionada, o arquivo de dados abre como o TIC.
(Cromatograma de íon extraído) XIC	Um cromatograma iônico criado por valores de intensidade de um único valor de massas discreto ou uma faixa de massa de uma série de varredura do espectro de massa. Ele indica o comportamento de uma dada massa ou faixa de massa em função do tempo.
BPC (Cromatograma de Pico de Base)	Um gráfico cromatográfico que mostra a intensidade do íon mais intenso dentro de uma varredura versus tempo ou número de scan.
TWC (cromatograma com comprimento de onda total)	Uma visão cromatográfica criada pela soma de todos os valores de absorbância na faixa de comprimento de onda adquirida e então colocados em gráfico de valores em relação ao tempo. Consiste das absorbâncias somadas de todos os íons em uma varredura colocada em gráfico em função do tempo em um painel cromatográfico.
WXC (cromatograma de comprimento de onda extraído)	Um subconjunto de TWC. Um XWC mostra a absorbância para um único comprimento de onda ou a soma da absorbância de uma faixa de comprimentos de onda.
DAD (Detector de Arranjo de Diodo)	Um detector de UV que monitora o espectro de absorção de compostos de eluição de um ou mais comprimentos de onda.

Mostrar TICs de um Espectro

Para ver um arquivo de dados de exemplo, tenha certeza de que o projeto **Example** está selecionado. Abra a pasta **Triple Quad** e então abra o arquivo **Mix_batch_1.wiff**.

- Clique em **Explore (Explorar) > Show (Mostrar) > Show TIC (Mostrar TIC).**

  O TIC abre em um novo painel.

Dica! Clique com o botão direito dentro de um painel contendo um espectro e então clique em **Show TIC** (Mostrar TIC).

Gerar um espectro a partir de um TIC

1. Em um painel contendo um TIC, selecione um intervalo.
2. Clique **Explore (Explorar) > Show (Mostrar) > Show Spectrum (Mostrar Espectro).**

   O espectro abre em um novo painel.

   Dica! Clique duas vezes no painel **TIC** num determinado momento para exibir o espectro.

Sobre a Geração de XICs

Os XICs podem ser gerados apenas a partir de cromatogramas ou espectros de período e experimento únicos. Para obter um XIC a partir de dados de um experimento múltiplo, divida os dados em painéis separados clicando no triângulo abaixo do eixo-x. Consulte a *Tabela 10-8 na página 101* para mais informações sobre a utilização dos ícones disponíveis.

Diversos métodos estão disponíveis para íons extraídos para gerar um XIC, dependendo se estão sendo usados dados cromatográficos ou espectrais. A *Tabela 10-5* contém um resumo dos métodos que podem ser usados com cromatogramas e espectros.

Tabela 10-5 Resumo dos Métodos de Geração de XIC

Método	Uso com Cromatograma	Uso com Espectro	Extração
Intervalo Selecionado	Não	Sim	Íons extraídos de uma área selecionada em um espectro.
Máximo	Não	Sim	Íons extraídos de uma área selecionada em um espectro usando o pico mais intenso na área selecionada. Esta opção cria um XIC usando a massa máxima da variação espectral selecionada.

Tabela 10-5 Resumo dos Métodos de Geração de XIC (continuação)

Método	Uso com Cromatograma	Uso com Espectro	Extração
Massas do pico de base	Sim	Sim	Podem apenas ser usadas com Cromatogramas do Pico de Base (BPCs). Use o comando **Use Base Peak Masses (Usar Massas do Pico de Base)** para extrair os resultados de íons em um XIC com um traço colorido diferente para cada massa. Se a seleção inclui diversos picos, então o XIC resultante terá um número igual de traços coloridos representando cada massa.
Massas Especificadas	Sim	Sim	Extrai íons de qualquer tipo de espectro ou cromatograma. Selecione até dez massas de início e término para os quais serão gerados XICs.

Gerar um XIC Usando um Intervalo Selecionado

1. Abra o arquivo contendo o espectro.
2. Selecionar um intervalo pressionando o botão esquerdo do mouse no início do intervalo, arrastando o cursor até o ponto de término e depois soltando o botão esquerdo do mouse.

   A seleção é indicada em azul.
3. Clique em **Explore (Explorar) > Extract Ions (Extrair Íons) > Use Range (Usar Intervalo).**

   Um XIC da seleção abre em um painel abaixo do painel do espectro. A informação do experimento no topo do painel contém a faixa da massa e a intensidade máxima em contagens por segundo.

Gerando um XIC usando o Pico Máximo

1. Abra o arquivo contendo o espectro.
2. Selecione uma faixa.

   A seleção é indicada em azul.
3. Clique em **Explore (Explorar) > Extract Ions (Extrair Íons) > Use Maximum (Usar Máximo).**

   Um XIC da seleção do pico máximo especificado abre abaixo do painel do espectro. A informação do experimento no topo do painel contém a faixa da massa e a intensidade máxima em contagens por segundo.

Gerar um XIC Usando Massas do Pico de Base

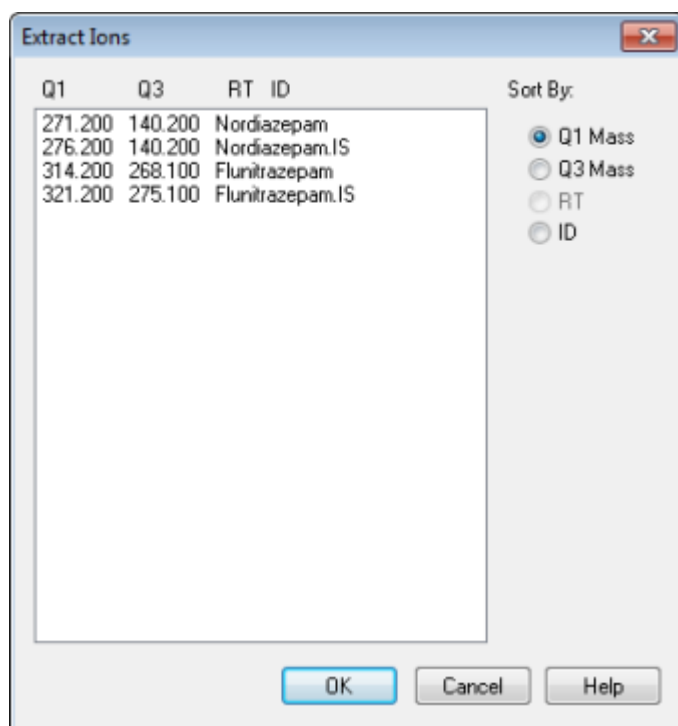
1. Abra o arquivo contendo o espectro.
2. em um BPC, selecione o pico o qual serão extraídos os íons.

   A seleção é indicada em azul.
3. Clique em **Explore (Explorar) > Extract Ions (Extrair Íons) > Use Base Peak Masses (Usar Massas do Pico de Base).**

   Um XIC da seleção especificada abre abaixo do painel do espectro. A informação do experimento no topo dos painéis mostra a variação da massa e a intensidade máxima em contagens por segundo.

Extrair Íon por Seleção das Massas

1. Abra um espectro ou cromatograma.
2. Clique em **Explore (Explorar) > Extract Ions (Extrair Íons) > Use Dialog.**

Figura 10-3 Caixa de Diálogo Extrair Íons

3. Digite o valor para cada XIC a ser criado. Se um valor de parada não for digitado, então o intervalo é definido pelo valor de início.

   - No campo **Start** (Iniciar), digite o valor de início (menor valor) para o intervalo da massa.
   - No campo **Stop** (Parar), digite o valor de término (maior valor) para o intervalo da massa.

4. Clique em **OK**.

   Um XIC da seleção abre abaixo do painel do cromatograma. A informação do experimento no topo do painel inclui as massas e a intensidade máxima em contagens por segundo.

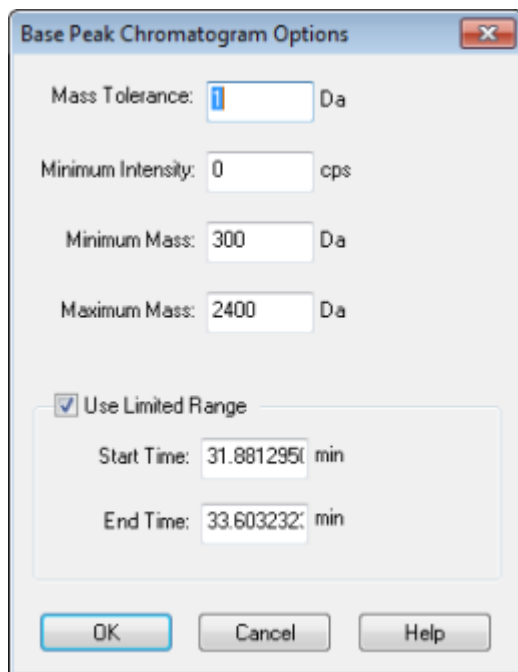
Gerar BPCs

BPCs podem ser gerados apenas a partir de dados de único período e único experimento.

1. Abra um arquivo de dados.
2. Selecione uma área dentro de um TIC.

   A seleção é indicada em azul.
3. Clique em **Explore (Explorar) > Show (Mostrar) > Show Base Peak Chromatogram (Mostrar Cromatograma do Pico de Base).**

   As seleções são mostradas nos campos **Start Time (Tempo Inicial)** e **End Time** (**Tempo Final**).

   Figura 10-4 Opções do Pico de Base do Cromatograma

4. No campo **Mass Tolerance** (Tolerância de Massa), digite o valor para indicar a variação de massa usada para achar um pico. O software encontra o pico usando um valor que é dobro da faixa digitada (± o valor da massa).
5. Digite a intensidade abaixo dos quais os picos serão ignorados pelo algoritmo no campo **Minimum Intensity** (Intensidade Mínima).
6. Digite a massa que determina o início do intervalo da varredura no campo **Minimum Mass** (Massa Mínima).

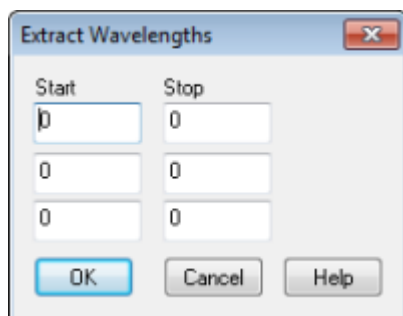
7. Digite a massa que determina o final do intervalo da varredura no campo **Maximum Mass** (Massa Mínima).
8. Para configurar os tempos iniciais e finais, selecione a caixa de verificação **Use Limited Range** (Usar Intervalo Limitado) e faça o seguinte:
   - No campo **Start Time** (Tempo Inicial), digite o tempo que determina o início do experimento.
   - No campo **End Time** (Tempo Final) digite o tempo que determina o final do experimento.
9. Clique em **OK**.

   A BPC é gerada em um novo painel.

Gerar XWCs

Até três faixas podem ser extraídas a partir de um espectro de DAD para gerar o XWC. Consulte a *Tabela 10-8 na página 101* para mais informações sobre a utilização dos ícones disponíveis.

1. Abra o arquivo de dados que contém um espectro DAD.
2. Clique com o botão direito em qualquer lugar do painel e, em seguida, clique em **Extract Wavelengths (Extrair Comprimento de Onda)**.

Figura 10-5 Caixa de diálogo Extract Wavelengths (Extrair Comprimento de Onda)

3. Digite os valores de **Start (Iniciar)** e **Stop (Parar)**.
4. Clique em **OK**.

   O XWC abre no painel abaixo do espectro DAD.

Gerar Dados DAD

Assim como os dados do espectrômetro de massas, os dados DAD podem ser vistos no cromatograma ou em formato de espectro

1. Abra o arquivo de dados contendo os dados adquiridos com um DAD.

   O TWC, que é análogo ao TIC, abre no painel abaixo do TIC.

2. No painel **TWC**, clique em um ponto para selecionar um único ponto no tempo ou destacar uma área do espectro para selecionar um intervalo de tempo.
3. Clique em **Explore (Explorar) > Show (Mostrar) > Show DAD TWC (Mostrar DAD TWC).**

   O espectro DAD abre em um painel abaixo do TWC. O eixo y apresenta a absorbância e o eixo x mostra o comprimento de onda.

   Dica! Se o painel com a TWC estiver fechado, clique em um ponto em qualquer lugar do TWC para abri-lo novamente. Clique em **Explore (Explorar) > Show (Mostrar) > Show DAD TWC (Mostrar DAD TWC).**

Gerar TWCs

Um TWC mostra a absorbância total (mAU) no eixo-y do gráfico contra o tempo no eixo-x. Consulte a *Tabela 10-8 na página 101* para mais informações sobre a utilização dos ícones disponíveis.

1. Abra o arquivo de dados que contém um espectro DAD.
2. Clique em **Explore (Explorar) > Show (Mostrar) > Show DAD TWC (Mostrar TWC do DAD).**

   O TWC abre no painel abaixo do espectro DAD.

   Dica! Clique com o botão direito dentro do painel contendo o espectro DAD e então clique em **Show DAD TWC.** (Mostrar TWC do DAD)

Ajustar o Limiar

O limiar é uma linha invisível desenhada paralela ao eixo-x de um gráfico que determina um limite abaixo do qual o software não incluirá picos de um espectro. A linha possui um controle, representado por um triângulo à esquerda do eixo-y. Clique no triângulo azul para visualizar uma linha pontilhada que representa o limiar. O limiar pode ser aumentado ou reduzido, mas mudar o valor do limiar não muda os dados. O software não rotula quaisquer picos na região que fica abaixo do limiar.

1. Abra um arquivo de dados.
2. Faça um dos seguintes:

   - Para aumentar o limiar, arraste o triângulo azul até o eixo-y. Pare reduzir o limiar, arraste o triângulo azul para baixo.
   - Clique em **Explore (Explorar) > Set Threshold (Definir Limiar).** Na caixa de diálogo **Threshold Options (Opções de Limiar)** que abre, digite o valor do limiar e clique em **OK**.
   - Clique em **Explore (Explorar) > Threshold (Limiar).**

   O gráfico atualiza para mostrar o novo limiar. O rótulo do pico e a lista do pico também são atualizados.

Painéis de Cromatograma

Tabela 10-6 Menu dos Painéis de Cromatograma

Menu	Função
Lista de Dados	Lista os pontos de dados e integra os picos encontrados nos cromatogramas.
Mostrar Espectro	Gera um novo painel contendo o espectro.
Mostrar Contorno do Gráfico	Mostra o contorno colorido de um conjunto de dados, em que a cor representa a intensidade dos dados naquele ponto. Somente determinados modos de MS têm essa opção.
Extrair Íons	Extrai um íon específico ou conjunto de íons de um painel selecionado e em seguida gera um novo painel contendo um cromatograma para os íons específicos.
Mostrar Cromatograma do Pico de Base	Gera um novo painel contendo um cromatograma de pico de base.
Mostrar os dados ADC	Gera um novo painel contendo traço de dados UV, se adquirido.
Mostrar Dados de Detector UV	Gera um novo painel contendo traço de dados UV, se adquirido.
Assistente Aritmético de Espectro	Abre o Assistente Aritmético de Espectro
Salvar como Arquivo de Texto	Gera um arquivo de texto do painel, que pode ser aberto no Microsoft Excel ou outros programas.
Salvar Histórico do Explore (Explorar)	Salva informações sobre alterações para processamento de parâmetros, também chamado de **Processing Options (Opções de Processamento)**, que foram feitas quando um arquivo .wiff foi processado no modo **Explore (Explorar)**. O histórico de processamento é armazenado em um arquivo com extensão .EPH (Explore Processing History) (Histórico de Processamento do Explore).
Adicionar Legenda	Adiciona uma legenda no ponto do cursor no painel.
Adicionar Texto do Usuário	Adiciona uma caixa de texto no ponto do cursor no painel.
Configurar o intervalo de substrato	Configura o intervalo de substrato no painel.
Limpe o Intervalo de Substrato	Limpa o intervalo de substrato no painel.
Intervalo de Substrato Travado	Bloqueia ou desbloqueia os intervalos de substrato. Se os intervalos de substrato não estiverem travados, então, cada intervalo de substrato pode ser movido de forma independente. Os intervalos de substrato são pré-definidos para ficarem travados.
Excluir Painel	Exclui o painel selecionado.

Painéis de Espectros

Tabela 10-7 Menu do botão direito para Painéis de Espectro

Menu	Função
Lista de Dados	Lista os pontos de dados e integra cromatogramas.
Mostrar TIC	Gera um novo painel contendo o TIC.
Extrair Íons (Usar Intervalos)	Extrai um íon específico ou conjunto de íons de um painel selecionado e em seguida gera um novo painel contendo um cromatograma para os íons específicos.
Extrair Íons (Usar Máximo)	Extrai íons utilizando o pico mais intenso na área selecionada.
Salvar como Arquivo de Texto	Gera um arquivo de texto do painel, o qual pode ser aberto no Excel ou outros programas.
Salvar Histórico do Explore (Explorar)	Salva informações sobre alterações para processamento de parâmetros, também chamado de **Processing Options (Opções de Processamento)**, que foram feitas quando um arquivo .wiff foi processado no modo **Explore (Explorar)**. O histórico de processamento é armazenado em um arquivo com extensão .EPH (Explore Processing History) (Histórico de Processamento do Explore).
Adicionar Legenda	Adiciona uma legenda no ponto do cursor no painel.
Adicionar Texto do Usuário	Adiciona uma caixa de texto em um ponto do cursor no painel.
Mostrar a Última Varredura	Mostra a varredura anterior à seleção.
Selecionar Picos para Rótulo	Nesta caixa de diálogo, selecione os parâmetros para diminuir os rótulos de pico.
Excluir Painel	Exclui o painel selecionado.
Adicionar um Registro	Adiciona registros e dados relacionados ao composto, incluindo espectros, à biblioteca. Um espectro ativo é exigido para realizar esta tarefa.
Buscar na Biblioteca	Busca na biblioteca sem restrições ou com restrições salvas anteriormente.
Definir Restrições de Busca	Buscas na biblioteca usando os critérios digitados na caixa de diálogo **Search Constraints (Restrições de Busca)**.

Processamento de Dados

Dados de gráficos podem ser processados de muitas maneiras. Esta seção fornece informações e procedimentos para a utilização de algumas das ferramentas mais utilizadas.

O usuário pode aumentar o zoom em uma parte de um gráfico para ver um pico particular ou uma área com mais detalhes tanto nos espectros como em cromatogramas. O usuário também pode aumentar o zoom repetidamente para ver os picos menores.

Recomenda-se que os usuários não usem os recursos de Subconjunto (Subsetting) incluídos no software

Gráficos

Os mesmos dados podem ser analisados em diferentes formas. Os dados também podem ser mantidos para fins de comparação, antes de executar as operações de processamento, tal como Smoothing (alisamento de pico) ou subtração.

Uma janela contém um ou mais painéis dispostos de tal maneira que todos os painéis estão totalmente visíveis e que não se sobreponham.

Painéis podem ser de tamanho fixo ou variável. Painéis são automaticamente colocados dentro da janela e são organizados em formato de colunas e linhas. Se o tamanho de uma janela for alterado, os painéis de dentro da janela mudam em tamanho para acomodar o novo tamanho. A janela não pode ser dimensionada para o ponto em que qualquer um dos painéis fique menor do que a sua dimensão mínima.

Duas ou mais janelas ou painéis contendo dados semelhantes podem ser conectados, por exemplo, espectros de massa com faixas de massa semelhantes. Conforme um painel ou janela é ampliada o outro painel é ampliado simultaneamente. Por exemplo, o usuário pode conectar um XIC para o BPC a partir do qual o XIC foi extraído. Ampliar o BPC também amplia o XIC, de modo que ambos os cromatogramas mostrem a mesma ampliação.

Gerenciar Dados

- Use as seguintes opções do menu ou os ícones para gerenciar os dados nos gráficos.

Tabela 10-8 Opções de Gráfico

Para fazer isto...	use esta opção do menu...	...ou clique neste ícone
Copie um gráfico em uma nova janela.	Selecione o gráfico e copie. Clique em **Explore (Explorar) > Duplicate Data (Duplicar Dados) > In New Window (Em Nova Janela).**	
Reescalar o gráfico para seu tamanho original	Selecione o gráfico. Clique em **Explore (Explorar) > Home Graph (Gráfico Original).**	

Tabela 10-8 Opções de Gráfico (continuação)

Para fazer isto...	use esta opção do menu...	...ou clique neste ícone
Mover um painel	• Selecione o gráfico. Clique em **Window (Janela) > Move Pane (Mover Painel).** • Selecione o painel ou janela e arraste-o para a nova posição. Esta posição pode ser dentro da mesma janela ou dentro de outra janela. Uma seta de quatro pontas é mostrada quando o cursor está no limite da janela ou do painel ativo. • Se o painel estiver no topo ou base do painel alvo, então o painel se move acima ou abaixo daquele painel, respectivamente. • Se o painel estiver na esquerda ou direita do painel alvo, então o painel se move para a esquerda ou direita daquele painel, respectivamente. • Se o painel estiver em qualquer outra posição, então o painel se move para a linha alvo. A sombra no painel indica sua nova posição conforme é movido.	
Conecte os painéis	a. Com os dois gráficos abertos, clique em um para tornar aquele painel ativo. b. Clique em **Explore (Explorar) > Link** e depois clique no outro painel.	
Remover a conexão	Feche um dos painéis. Clique em **Explore (Explorar) > Remove Link (Remover Link).**	
Excluir um painel	Selecione o gráfico. Clique em **Window (Janela) > Delete Pane (Excluir Painel).**	
Bloquear um painel	Selecione o gráfico. Clique em **Window (Janela) > Lock Panes (Bloquear Painéis).**	
Ocultar um painel	Selecione o gráfico. Clique em **Window (Janela) > Hide Pane (Ocultar Painel).**	

Tabela 10-8 Opções de Gráfico (continuação)

Para fazer isto...	use esta opção do menu...	...ou clique neste ícone
Maximizar um painel	Selecione o gráfico. Clique em **Window (Janela) > Maximize Pane (Maximizar Painel).**	
Dividir painéis	Selecione o gráfico. Clique em **Window (Janela) > Tile all Panes (Dividir todos os Painéis).**	

Aumento no Eixo Y

1. Mova o cursor para a esquerda do eixo-y para qualquer lado da área a ser expandida e então arraste para fora do ponto inicial em uma direção vertical enquanto segura o botão esquerdo do mouse.

   Uma caixa foi projetada ao lado do eixo-y, representando uma nova escala.

   Nota: Fique atento ao aumentar no valor de referência. Se aumentar muito, a caixa de aumento fecha.

2. Libere o botão do mouse para desenhar o gráfico na nova escala.

Aumento no Eixo X

Dica! Para retornar o gráfico a sua escala original, clique duas vezes em qualquer eixo. Para restaurar todo o gráfico para sua escala original, clique em **Explore (Explorar) > Home Graph (Gráfico Original).**

1. Mova o cursor sob o eixo-y para qualquer lado da área a ser expandida e então arraste para fora do ponto inicial em uma direção horizontal enquanto segura o botão esquerdo do mouse.
2. Libere o botão do mouse para desenhar o gráfico na nova escala.

Instruções de Operação - Analisar e Processar Dados Quantitativos 11

Use os arquivos de amostra encontrados na pasta **Example** (Exemplo) para saber como selecionar amostras para quantificação, como selecionar consultas pré-definidas e criar consultas específicas para tabela e como analisar os dados adquiridos. Para mais informações sobre os seguintes tópicos, consulte o *Guia Avançado do Usuário*.

- **Metric Plots (Gráficos Métricos)**
- Modelo de uma **Results Table (Tabela de Resultados)**

Análise Quantitativa

A análise quantitativa é usada para encontrar a concentração de uma determinada substância em uma amostra. Ao analisar uma amostra desconhecida e compará-la com outras amostras contendo a mesma substância com concentrações conhecidas (padrão), o software pode calcular a concentração da amostra desconhecida. O processo envolve a criação de uma curva de calibração usando os padrões e, em seguida, calculando a concentração para a amostra desconhecida. As concentrações calculadas de cada amostra são, então, disponibilizadas em uma **Results Table (Tabela de Resultados)**.

Métodos de Quantificação

Um método de quantificação é um conjunto de parâmetros usado para gerar picos em uma amostra. O método de quantificação pode incluir parâmetros usados para localizar e integrar os picos, gerar curvas padrão e calcular concentrações desconhecidas. Um método de quantificação salvo anteriormente pode ser selecionado do menu **Quantitation** (Quantificação) na lista de amostras. Para informações sobre criar uma lista, consulte *Adicionar Conjuntos e Amostras a Listas na página 74*.

O usuário pode criar um método de quantificação antes da aquisição de dados e então aplicar o método aos dados quantitativos automaticamente após a lista estar completa. De forma alternativa, um método de quantificação pode ser criado e aplicado após a aquisição.

Três ferramentas podem ser usadas para criar um método de quantificação: o **Quantitation Wizard** (Assistente de Quantificação), o **Build Quantitation Method** (Criar Método de Quantificação) e o **Quick Quant** (Quant. Rápida).

Assistente de Quantificação

Com o **Quantitation Wizard (Assistente de Quantificação)**, uma **Results Table (Tabela de Resultados)** é gerada ao mesmo tempo que um método de quantificação. Alternativamente, um método de quantificação existente pode ser utilizado para quantificar diferentes conjuntos de dados. Esta é a forma mais comum de criar um método de quantificação.

Criar Método de Quantificação

O **Build Quantitation Method (Criar Método de Quantificação)** não gera uma **Results Table (Tabela de Resultados)**, embora o método possa ser subsequentemente usado no **Quantitation Wizard (Assistente de Quantificação)** para criar uma **Results Table (Tabela de Resultados)**. **Build Quantitation Method (Criar Método de Quantificação)** também pode ser usado para alterar os métodos de quantificação existentes. Esta é a maneira mais flexível de criar m método de quantificação.

Quant. Rápida

Quick Quant (Quant. Rápida)é parte do **Batch Editor (Editor de Lista)**. Use **Quick Quant (Quant. Rápida)** para adicionar concentrações do composto antes da aquisição de dados. Uma vez que a amostra não foi adquirida, uma amostra representativa não pode ser selecionada nem os picos podem ser revisados. Com este processo, somente os componentes do método são definidos.

Sobre Tabelas de Resultados

As **Results Tables (Tabelas de Resultados)** resumem a concentração calculada de um analito em cada amostra desconhecida com base na curva de calibração. As **Results Tables (Tabelas de Resultados)** também incluem as curvas de calibração bem como as estatísticas para os resultados. O usuário pode personalizar a **Results Tables (Tabelas de Resultados)** e visualizar as **Results Tables (Tabelas de Resultados)** em formatos (lay-outs).

Os dados de uma **Results Tables (Tabelas de Resultados)** podem ser exportados para um arquivo .txt para uso em outros aplicativos, como o Microsoft Excel. O usuário também pode exportar os dados na tabela ou somente os dados nas colunas visíveis.

Métodos de Quantificação e Tabelas de Resultados

Para os seguintes procedimentos, use os dados de amostra que estão instalados com o software. **PK Data** (Dados de PK) contém as listas**Mix_Batch1** e **Mix_Batch2**. Estas listas de amostras são usadas para demonstrar a utilidade dos gráficos métricos em isolar as amostras problemáticas. Os íons verificados foram reserpina (609,3/195,0), minoxidil (210,2/164,2), tolbutamida (271,1/91,1) e rescinamina (635,3/221,2), que é o padrão interno. A Lista 1 não apresenta erros nos termos de preparo da amostra, enquanto que a Lista 2 contém uma amostra QC na qual o padrão interno foi adicionado duas vezes (amostra QC2).

Criar um Método Usando o Editor de Método de Quantificação

Pré-requisitos
• *Alterar Entre Projetos e Subprojetos na página 45*
• *Mostrar os Dados Quantitativos Básicos na página 91*

1. Na barra de navegação, em **Quantitate (Quantificar)**, clique das vezes em **Quantitation Wizard (Assistente de Quantificação)**.

   A caixa de diálogo **Select Sample (Selecionar Amostra)** abre.
2. Clique duas vezes na pasta **Triple Quad** na lista **Data Files (Arquivos de Dados)**.

3. Selecione **Mix_batch_2. wiff**.

   As amostras no arquivo de dados selecionado são mostradas na lista **Samples (Amostras)**.

   Nota: Se o campo **Compound ID (ID do Composto)** foi preenchido para as amostras e os padrões internos no método de aquisição, em seguida, na tabela **Padrões Internos**, em que um valor no campo **Q1/Q3** é selecionado, o campo **Name (Nome)** é preenchido automaticamente

4. Clique em **OK**.
5. Na tabela **Internal Standards (Padrões Internos)**, na coluna **Name (Nome)**, selecione rescinamina (635,3/221,2).
6. Na tabela **Analytes (Analitos)**, faça o seguinte:

   a. Na coluna **Name (Nome)**, selecione rescinamina.
   b. Na coluna **Internal Standard (Padrão Interno)**, a partir da lista, selecione o padrão interno a ser associado com cada analito.
   c. Na coluna **Q1/Q3**, selecione 609,3/195,0.
   d. Se necessário, adicione um ou mais dos outros componentes para uma análise complexa.

   Nota: Se o campo **Compound ID (ID do Composto)** foi preenchido para as amostras e os padrões internos no método de aquisição, então, na tabela **Analytes (Analitos)**, o campo **Name (Nome)** e o campo **Q1/Q3** devem ser preenchidos.

7. Clique na aba **Integration (Integração)**.

   Os parâmetros de integração pré-definidos são adequados para a maioria dos picos.

8. Se a integração não é adequada, então altere o algoritmo.
9. Clique no ícone **Show or Hide Parameters (Mostrar ou Ocultar Parâmetros)** para mostrar os algoritmos de integração adicionais.
10. Clique na aba **Calibration (Calibração)**.

    Os parâmetros pré-configurados são adequados para essas amostras.

11. Salve o método de quantificação

    O novo método pode ser utilizado quando uma lista é criada no **Batch Editor (Editor de Lista)**, ou quando o **Quantitation Wizard (Assistente de Quantificação)** é utilizado para gerar uma **Results Table (Tabela de Resultados)**.

    Dica! O método de quantificação só pode ser usado no projeto atual, a menos que ele seja copiado para um outro projeto. Clique em **Tools (Ferramentas) > Project (Projeto) > Copy Data (Copiar Dados).** Um novo projeto deve ser criado e selecionado para estar disponível para uso.

Criar uma Tabela de Resultados Usando o Assistente de Quantificação

Pré-requisitos
• *Alterar Entre Projetos e Subprojetos na página 45* • *Mostrar os Dados Quantitativos Básicos na página 91*

1. Na barra de navegação, abaixo de **Quantitate** (Quantificar), clique duas vezes em **Quantitation Wizard** (Assistente de Quantificação).

   A página **Create Quantitation Set - Select Samples** (Criar Configuração de Quantificação - Selecionar amostras) abre.
2. Clique duas vezes na pasta **Triple Quad** na lista **Available Data Files (Arquivos de Dados Disponíveis)**.
3. Selecione **Mix_batch_2. wiff**.
4. Clique em **Add All** (Adicionar Tudo).

   Nota: É recomendado que o usuário não processe ou relate os resultados de quaisquer amostras para as quais a aquisição foi encerrada de forma anormal ou inesperada.
5. Clique em **Next** (Próximo).

   A página **Create Quantitation Set - Select Settings & Query** (Criar Configuração de Quantificação - Selecionar Configurações e Consulta) abre.
6. Clique em **Select Existing: Query (Selecionar Existente: Consulta)** na seção **Default Query (Consulta Padrão)**.
7. Selecione **Accuracy 15% (Precisão)** da lista **Query (Consulta)**.

   Nota: Para criar uma consulta ao mesmo tempo, consulte *Criar uma Consulta Padrão na página 108*.
8. Clique em **Next** (Próximo).

   A página **Create Quantitation Set - Select Method** (Criar Configuração de Quantificação - Selecionar Método) abre.
9. Clique em **Choose Existing Method** (Escolha o Método Existente).
10. Selecione **PK Data_Mix.qmf** da lista **Method** (Método).
11. Clique em **Finish** (Concluir).

    A **Results Table** (Tabela de Resultados) abre.

Dica! Para adicionar ou remover as amostras na **Results Table** (Tabela de Resultados), clique em **Tools (Ferramentas) > Results Table(Tabela de Resultados) > Add/Remove Samples (Adicionar/Remover Amostras).**

12. Salve a **Results Table (Tabela de Resultados)**.

Nota: É recomendado que o usuário não mude os nomes dos arquivos de dados (.wiff) se uma **Results Table (Tabela de Resultados)** incluir amostras daquele arquivo.

Dica! Relatórios bem formatados podem ser criados a partir de uma **Results Table (Tabela de Resultados)** usando o software Reporter. Recomenda-se que o usuário valide os resultados se um modelo do Reporter que contém uma consulta for utilizado. Consulte *Software Reporter na página 123*.

Criar uma Consulta Padrão

Uma consulta e uma consulta padrão pode ser criada de diversas formas. A seguinte é um exemplo. Para mais informações sobre criação de consultas, consulte a Ajuda.

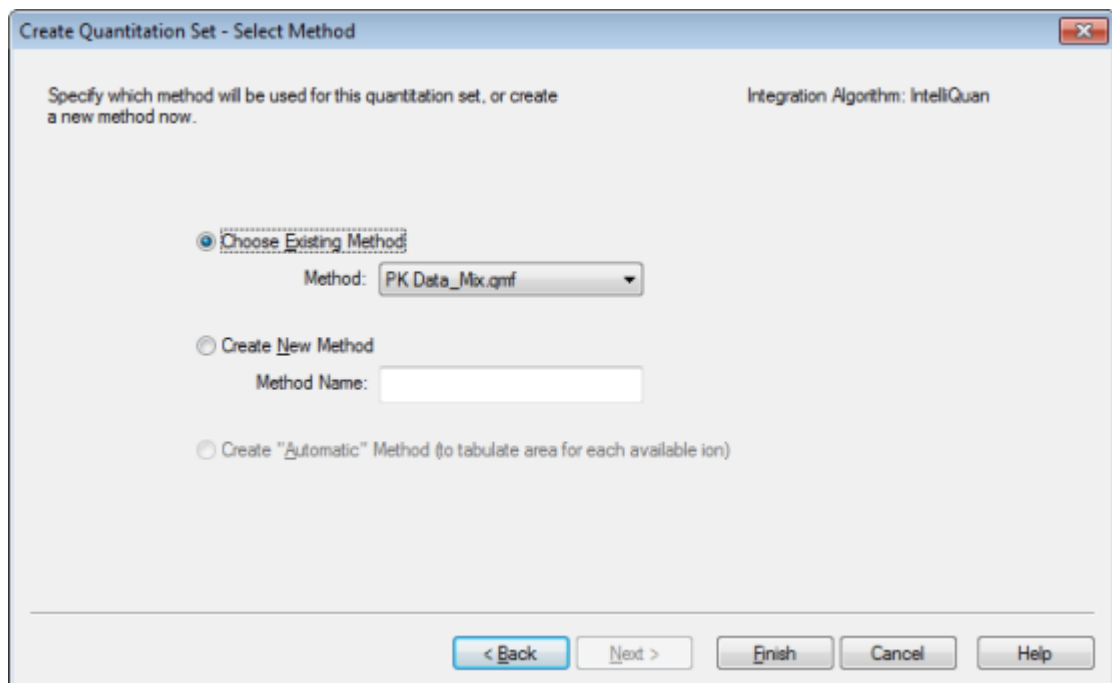
1. Na barra de navegação, abaixo de **Quantitate** (Quantificar), clique duas vezes em **Quantitation Wizard** (Assistente de Quantificação).
2. Selecione as amostras na página **Create Quantitation Set - Select Samples** (Criar Configuração de Quantificação - Selecionar Amostras).
3. Clique em **Next** (Próximo).
4. Na página **Select Settings & Query** (Selecionar Configurações e Consulta), na seção **Default Query** (Consulta Padrão), selecione **Create New Standard Query** (Criar Nova Consulta Padrão).
5. Digite um nome da consulta.

Figura 11-1 Página Criar Configuração de Quantificação - Selecionar Configurações e Consulta

6. Clique em **Next** (Próximo).

Figura 11-2 Página Criar Configuração de Quantificação - Criar Consulta Padrão

7. Na tabela **Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%) (Variação de Precisão Máxima Permitida para QCs)**, na coluna **Max. Variation** (Variação Máx.), digite o percentual máximo permitido da variação para cada QC (por exemplo, 5 é ± 5%) na mesma linha que a concentração correspondente. Se as concentrações não foram especificadas durante a aquisição, então elas não são mostradas aqui. Neste caso, digite-as na coluna **Concentration (Concentração)**.
8. Na tabela **Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%) (Variação de Precisão Máxima Permitida para Padrões)** , na coluna **Max. Variation** (Variação Máx.) digite o percentual máximo permitido da variação para cada padrão (por exemplo, 10 é ±10%) na mesma linha que a concentração correspondente. Se as concentrações não foram especificadas durante a aquisição, então elas não são mostradas aqui. Neste caso, digite-as na coluna **Concentration (Concentração)**.
9. Clique em **Next** (Próximo).

Figura 11-3 Página Criar Configuração de Quantificação - Selecionar Método

10. Selecionar ou criar um método.
11. Clique em **Finish** (Concluir).

    A consulta é aplicada como uma consulta padrão. Os resultados da consulta são mostrados como uma entrada **Pass (Aprovado)** ou **Fail (Reprovado)** na coluna **Standard Query Status (Status da Consulta Padrão)** da **Results Table (Tabela de resultados)**.

Dica! Para retornar para a visualização completa, clique com o botão direito e depois clique em **Full** (Completo).

Menu da Tabela de Resultados

Clique com o botão direito na **Results Table** (Tabela de Resultados) para acessar as opções mostradas na *Tabela 11-1* .

Tabela 11-1 Menu da Tabela de Resultados

Menu	Função
Full (Completo)	Mostra todas as colunas.
Summary (Resumo)	Mostra colunas específicas.
Analyte (Analito)	Mostra um analito específico.
Analyte Group (Grupo de Analito)	Cria um grupo de analito.
Sample Type (Tipo de Amostra)	Mostra amostras de um tipo específico ou todas as amostras.
Add Formula Column (Adicionar Coluna de Fórmula)	Adiciona uma coluna de fórmula. Recomendamos que o usuário valide os resultados se uma coluna de fórmula for usada.
Table Settings (Configurações da Tabela)	Edita ou seleciona uma configuração da tabela.
Query (Consulta)	Cria ou seleciona uma consulta.
Sort (Ordenar)	Cria uma ordem ou ordena por índice.
Metric Plot (Gráfico Métrico)	Cria um gráfico métrico.
Delete Pane (Excluir Painel)	Exclui o painel ativo.
Fill Down (Preencher)	Copia o mesmo dado nas células selecionadas.

Tabela 11-1 Menu da Tabela de Resultados (continuação)

Menu	Função
Add Custom Column (Adicionar Coluna Personalizada)	Adiciona uma coluna personalizada.
Delete Custom Column (Excluir Coluna Personalizada)	Exclui a coluna personalizada selecionada.

Revisão do Pico e Integração Manual dos Picos

Utilize a revisão do pico para examinar os picos que o software identificou e, em seguida, redefina o pico ou os pontos iniciais e finais, quando necessário.

Depois de identificar os analitos e os padrões internos que o software deva encontrar, o software busca os picos nas amostras. Quando o software identifica um pico, ele mostra os cromatogramas para cada analito e padrão interno na página **Create Quantitation Method: Define Integration (Criar Método de Quantificação: Definir Integração)** do **Standard Wizard** (Assistente Padrão) ou na aba **Integration (Integração)** do **Full Method Editor (Editor de Método Completo)**. O usuário pode confirmar os picos que são encontrados ou alterar o método de quantificação para definir melhor os picos. É recomendado que os usuários revisem manualmente todos os resultados de integração.

Revisão dos Picos

Durante uma revisão dos picos, o usuário pode querer visualizar um pico em sua totalidade ou examinar a base para descobrir quão precisamente o software encontrou os pontos de início e fim do pico. A ferramenta de aumento automático (automatic zooming) pode ser usada para fazer isto.

Para ajudar o software a encontrar um pico, defina os pontos inicial e final exatos do pico e linha de base manualmente. Estas alterações serão aplicadas apenas para aquele pico individual, a menos que o método global seja atualizado.

Nota: Nós recomendamos que os resultados manualmente integrados sejam validados.

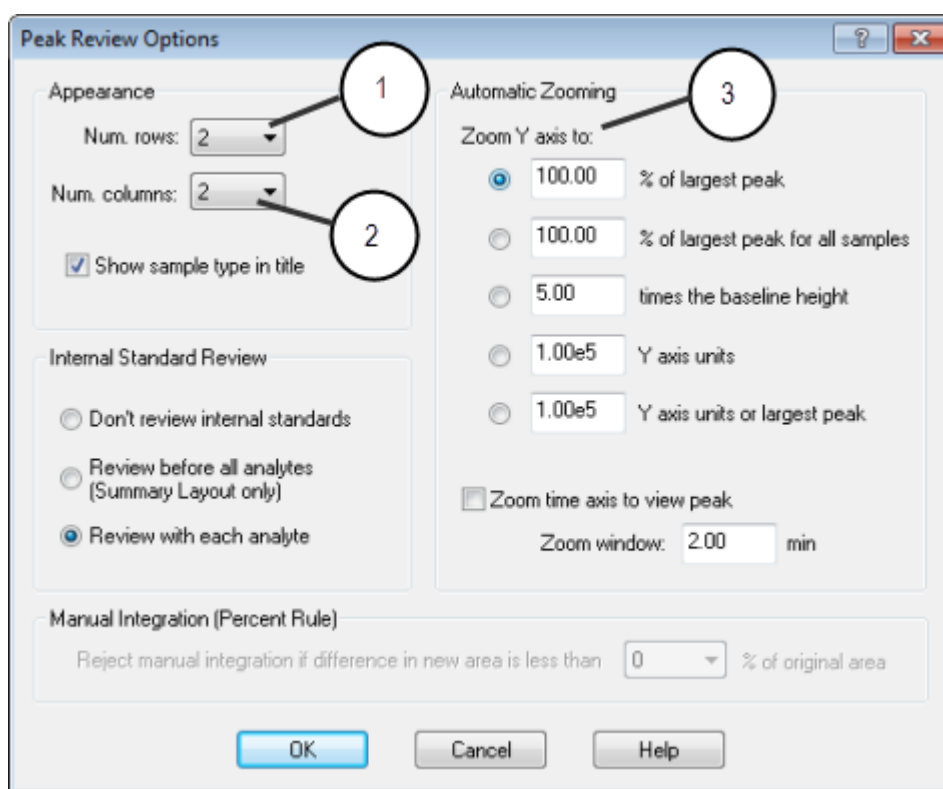
Dica! Para revisar um pico individual, clique duas vezes em um ponto na curva e depois clique em **Show Peak**. O software abre a janela **Peak Review** (Revisão do Pico) com o pico selecionado.

1. Clique com o botão direito em **Results Table** (Tabela de Resultados) e depois clique em **Analyte** (Analito).
2. Selecione uma amostra.

3. Clique em **Tools (Ferramentas)** **> Peak Review (Revisão do Pico)** **> Pane (Painel).**

   Os picos são mostrados abaixo da **Results Table** apenas com os picos listados na **Results Table** (Tabela de Resultados).

4. Clique com o botão direito no painel e depois clique em **Options** (Opções).
5. Na caixa de diálogo **Peak Review Options** (Opções de Revisão do Pico), na seção **Appearance** (Aparência), mude o **Num. rows** (Núm. de linhas) para **1** e **Num. columns** (Núm. de colunas) para **2**.
6. Na seção **Automatic Zooming** (Aumento Automático), clique em **Zoom Y axis to: 100% of largest peak** (Aumentar eixo Y para: 100% do maior pico) para mostrar o pico inteiro.

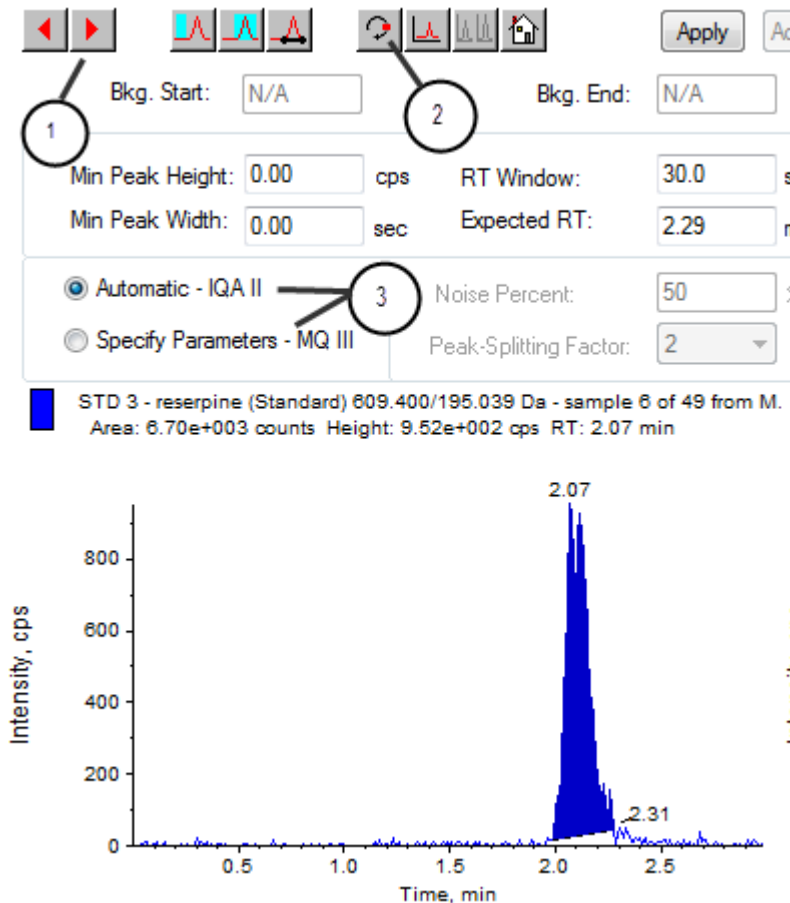
Figura 11-4 Opções na Caixa de Diálogo da Revisão do Pico

Item	Definição
1	Número de linhas
2	Número de colunas
3	**Zoom Y-axis to** 100% **of largest peak** (Aumentar eixo Y para: 100% do maior pico) para mostrar o pico inteiro

7. Clique em **OK**.
8. Para mover entre os picos, clique na seta apontando para a direita. Consulte a *Figura 11-5 na página 114*.

9. Vá para a segunda injeção do padrão 3.

   Neste exemplo, o pico pode ser integrado próximo à base ao selecionar a opção **Specify Parameters** (Especificar Parâmetros).

   Dica! para mover para um pico específico no painel **Peak Review** (Revisão do Pico) , selecione a linha correspondente na **Results Table** (Tabela de Resultados).

Figura 11-5 Painel de Revisão do Pico

Item	Definição
1	Setas: Clique para mover entre os picos.
2	Mostrar ou Ocultar os Parâmetros: clique para mostrar os parâmetros de integração.
3	Parâmetros de integração: Clique para mudar os parâmetros.

10. Clique duas vezes em **Show or Hide Parameters** (Mostrar ou Ocultar os Parâmetros).
11. Clique em **Specify Parameters - MQ III** (Especificar Parâmetros - MQ III).
12. Mude o valor de **Noise Percent** (Percentual de Ruído).

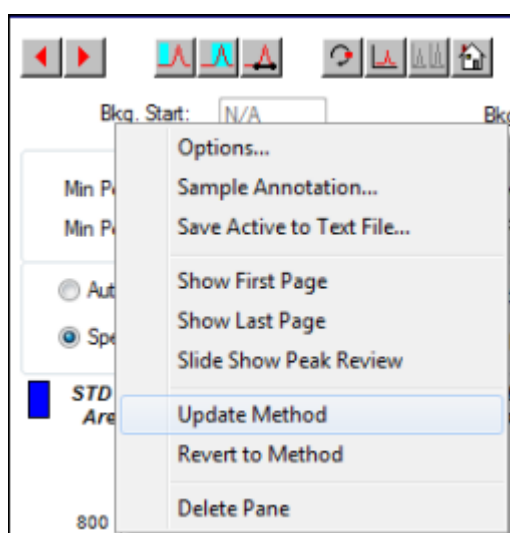
13. Clique em **Apply** (Aplicar).

    O pico está integrado próximo à base.

14. Se as mudanças não melhorarem a integração do pico, então ajuste o parâmetro **Noise Percent** (Percentual de Ruído) até que o valor ideal seja encontrado.

Nota: A função **Update Method** (Atualizar o Método) atualiza apenas os valores do algoritmo para aquele analito específico (ou padrão interno) e não todos os analitos.

15. Para atualizar o algoritmo para todos os picos, clique com o botão direito no painel e depois clique em **Update Method**.

Figura 11-6 Atualizar o Método

Picos Manualmente Integrados

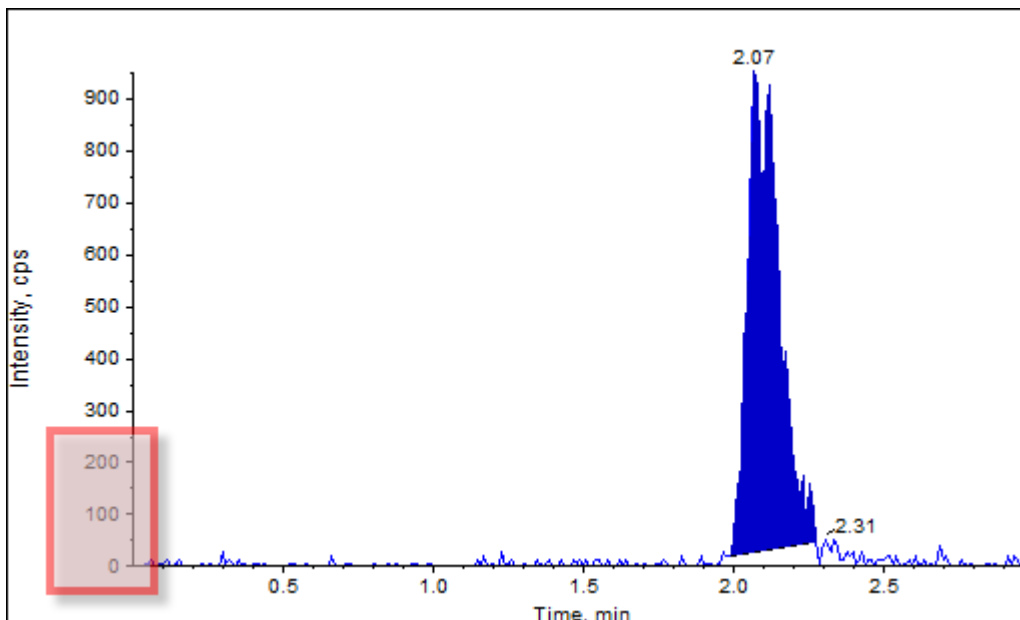
Os picos manualmente integrados devem ser realizados por último, para limitar a variabilidade entre pessoas. Integre os picos manualmente apenas se todos os picos não tiverem sido encontrados após o ajuste e atualização dos parâmetros do algoritmo.

Nota: Os picos que foram integrados manualmente, ou cujo algoritmo foi mudado apenas para aquele pico, são identificados na coluna **Record Modified** (Registro Modificado) da **Results Table** (Tabela de Resultados), pois são picos que tiveram mudanças no parâmetro do algoritmo para uma amostra que não são aplicadas para todo o grupo do analito.

1. No painel **Peak Review** (Revisão do Pico), clique em **Manual Integration Mode** (Modo de Integração Manual).

Figura 11-7 Painel Revisão do Pico: Integração Manual

2. Aumente os 10% inferiores do pico.

Figura 11-8 Painel Revisão do Pico: Aumentando um Pico

3. Mova o cursor no local o qual o começo do pico deve ser definido e arraste o cursor no local o qual o final do pico deve ser definido.

   O software tonaliza a área delimitada pela base e lados do pico. Os parâmetros do pico são cinza já que não são mais aplicáveis, pois o pico foi desenhado manualmente.

4. Faça um dos seguintes:

   - Para tornar esta mudança permanente, clique em **Accept** (Aceitar)
   - Para descartar as alterações, desmarque a caixa de verificação **Manual Integration** (Integração Manual).

Nota: Se o pico foi corrigido como selecionado originalmente, clique com o botão direito sobre o pico e então clique em **Revert to Method** (Reverter para Método).

Menu da Revisão do Pico

Clique com o botão direito na janela ou painel **Peak Review** (Revisão do Pico) para acessar as opções mostradas na *Tabela 11-2*.

Tabela 11-2 Menu da Revisão do Pico

Menu	Função
Options (Opções)	Abre a caixa de diálogo **Peak Review Options** (Opções de Revisão do Pico).
Sample Annotation (Anotação da amostra)	Abre a caixa de diálogo **Sample Annotation** (Anotação da amostra).
Save Active to Text File (Salvar o Arquivo de Texto Ativo)	Salva o pico selecionado como arquivo de texto.
Show First Page (Mostrar a Primeira Página)	Vai para a primeira amostra.
Show Last Page (Mostrar a Última Página)	Vai para a última amostra.
Slide Show Peak Review (Apresentação de Slide da Revisão do Pico)	Abre a apresentação de slides.
Update Method (Atualizar o Método)	Atualiza o algoritmo para todos os picos.
Revert to Method (Reverter o método)	Seleciona um pico redefinido com base no método de quantificação atual.
Delete Pane (Excluir Painel)	Exclui o painel ativo.

Curvas de Calibração

Use as curvas de calibração para achar a concentração calculada das amostras, incluindo as amostras de controle de qualidade (QC). As amostras QC são adicionadas em uma lista para estimar a qualidade e a precisão dos dados dos padrões na lista. As amostras QC possuem concentrações conhecidas do analito, mas são

tratadas como desconhecidas de forma que as concentrações medidas possam ser comparadas com o valor real.

A curva de calibração é gerada ao colocar a concentração do padrão versus sua área ou altura em um gráfico. Se um padrão interno for utilizado, então a razão da concentração padrão ou padrão interno versus a razão da altura de pico padrão ou a área da altura do pico do padrão interno é colocada no gráfico. A razão de área ou altura de uma amostra é então aplicada a esta curva para descobrir a concentração da amostra, como mostrado na **Results Table** (Tabela de Resultados). Uma equação de regressão é gerada por esta curva de calibração de acordo com a regressão que foi especificada. A equação de regressão é usada para calcular a concentração de amostras desconhecidas.

Visualizar as Curvas de Calibração

O usuário pode visualizar a curva de calibração e mudar as opções de regressão em uma **Results Table** (Tabela de Resultados) aberta. se duas ou mais **Results Tables** (Tabela de Resultados) estiverem abertas, então as curvas de calibração pode ficar sobrepostas. Para sobrepor curvas, tenha certeza de que o método usado para criar as tabelas é o mesmo.

Coloque a curva de calibração em um gráfico para ver a curva usada para a regressão. O campo **Calculated Concentration** (Concentração Calculada) na **Results Table** (Tabela de Resultados) reflete quaisquer alterações resultando do ajuste da curva aos pontos do padrão.

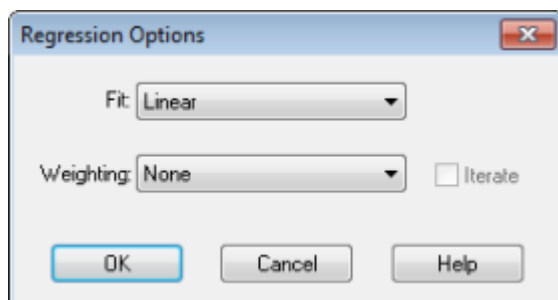
Nota: Esta opção está disponível apenas quando uma **Results Table** (Tabela de Resultados) está aberta no espaço de trabalho

1. abre uma **Results Table** (Tabela de Resultados).
2. Clique em **Tools (Ferramentas) > Calibration > Pane (Painel de Calibração).**

   O painel da **Calibration Curve** (Curva de Calibração) contendo a curva de calibração abre.
3. Se houver mais de um analito, então use as seguintes etapas para visualizar a curva de calibração para outro analito:

   a. A partir da lista **Analyte** (Analito), selecione um analito.
   b. Se solicitado, a partir da próxima lista, selecione **Area (Área)** ou **Height (Altura)**.
4. Para mudar as opções de regressão para a curva de calibração, faça o seguinte:

a. Clique em **Regression** (Regressão).

Figura 11-9 Caixa de Diálogo das Opções de Regressão

b. Selecione **Linear** (Linear) na lista **Fit** (Ajustar).

c. Selecione **1 / x** na lista **Weighting (Ponderação)**.

d. Clique em **OK**.

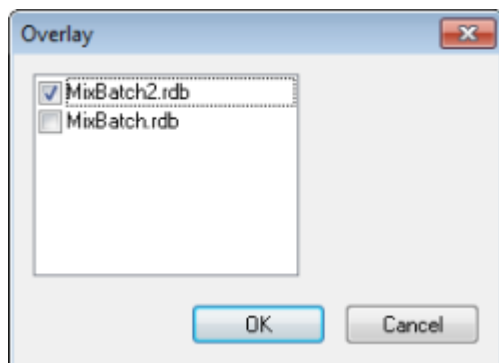
A curva de calibração abre. O usuário pode revisar os picos individuais na curva ou excluir pontos da curva para produzir uma curva melhor.

5. Se necessário, repita estas etapas para criar uma curva mais apropriada.
6. Para salvar as alterações, clique em **Accept** (Aceitar).

Sobrepor Curvas de Calibração

Dica! Para examinar a curva de uma determinada tabela de forma mais atenta, clique com o botão direito na curva e depois clique em **Active Plot (Gráfico Ativo)**. Selecione a curva a ser inserida em primeiro plano no gráfico.

1. Com uma ou mais **Results Tables (Tabelas de Resultados)** abertas, visualize uma curva de calibração para uma das tabelas.
2. Clique com o botão direito na curva de calibração e depois clique em **Overlay (Sobrepor)**.

Figura 11-10 Caixa de dialogo Overlay (sobreposição)

3. Selecione as tabelas a serem sobrepostas com a curva atual.

4. Clique em **OK**.

   O software coloca as curvas em gráficos para todas as tabelas selecionadas no mesmo gráfico.

Menu da Curva de Calibração

Clique com o botão direito na janela ou painel **Calibration** (Calibração) da tabela para acessar as opções mostradas na *Tabela 11-3*.

Tabela 11-3 Menu da Curva de Calibração

Menu	Função
Exclude (Include) (Excluir (Incluir))	Clique com o botão direito no ponto e então clique **Exclude** (Excluir) para excluir o ponto da curva. Clique com o botão direito no ponto e então **Include** (Incluir) para incluir o ponto.
Exclude All Analytes (Include All Analytes) (Excluir todos os Analitos (Incluir todos os Analitos))	Clique com o botão direito em um ponto e então clique **Exclude All Analyte** (Excluir Todos os Analitos) para excluir todos os analitos da curva. Clique com o botão direito em um ponto e então clique **Include All Analyte** (Incluir Todos os Analitos) para incluir os pontos.
Show Peak (Mostrar Pico)	Revisa um pico individual.
Overlay (Sobrepor)	Sobrepõe dois gráficos.
Active Plot (Gráfico Ativo)	Determina qual gráfico está ativo.
Legend (Legenda)	Mostra a legenda do gráfico.
Log Scale X Axis* (Escala Log no Eixo X*)	Utiliza uma escala log para o eixo-x.
Log Scale Y Axis* (Escala Log no Eixo Y*)	Utiliza uma escala log para o eixo-y.
Delete Pane (Excluir Painel)	Exclui o painel ativo.
Home Graph (Gráfico Original)	Volta a escala do gráfico para seu tamanho original
* Uma escala log organiza os pontos de dados em uma forma mais gerenciável de forma que o efeito de todos os pontos possa ser monitorado de forma simultânea. Para esta visualização, selecione a Escala Log do Eixo Y versus a Escala Log no Eixo X e não apenas o log de um eixo.	

Estatísticas da Amostra

Utilize as janela **Statistics (Estatísticas)** para ver as amostras estatísticas, tipicamente para padrões e QCs (controles de qualidade). Os dados de cada lista disponível na **Results Table (Tabela de Resultados)** abrem em forma de tabela na grade e uma linha de dados é mostrada para cada padrão ou concentração QC.

Visualizar os Dados Estatísticos para os Padrões e QCs

Quando mais de uma **Results Table** (Tabela de Resultados) estiver aberta, informações estatísticas sobre os padrões e QCs para as listas adicionais na janela **Statistics** (Estatísticas) podem ser obtidas. Isto facilita a comparação dos resultados entre as listas e a identificação de tendências nos padrões e QCs.

1. Abra uma **Results Table** (Tabela de Resultados).
2. Clique em **Tools (Ferramentas) > Statistics (Estatísticas).**
3. Selecione **Concentration (Concentração)** da lista **Statistics Metric (Métrica de Estatística)**.
4. Selecione um analito no campo **Analyte Name** (Nome do Analito).
5. Selecione **Standard** (Padrão) no campo **Sample Type** (Tipo de Amostra).

   Os resultados são mostrados.
6. Olhe as colunas **%CV** e **Accuracy (Precisão)**.

   A **%CV** mostra o coeficiente de variação entre as medidas de um único parâmetro, por exemplo, a área. **Accuracy (Precisão)** mostra quão perto o ponto no gráfico está do valor interpolado.
7. Se necessário, selecione a caixa de verificação **Display Low/High values (Exibir valores Altos/Baixos)** e depois examine os valores **Low** (Baixo), **High** (Alto) e **Mean** (Médio) para cada linha na grade. Cada linha representa padrões que possuem os mesmos níveis de concentração.
8. Selecione outro analito.

   Os resultados são mostrados em uma base por analito.
9. Para verificar variações no **Quality Control** (Controle de Qualidade) nos mesmos níveis de concentração, selecione **QC** no campo **Sample Type** (Tipo de Amostra).

Comparar Resultados Entre Listas

O número dos analitos e o nome dos analitos devem ser os mesmos para os dados a serem combinados no painel **Statistics** (Estatísticas).

1. Abra uma **Results Tables (Tabela de Resultados)**.
2. Clique em **Tools (Ferramentas) > Statistics (Estatísticas).**
3. Faça um dos seguintes:

   - Selecione **Group By Batch (Agrupar por Lista)** para organizar estes resultados na **Results Table (Tabela de Resultados)** na lista **Conc. as Rows (Conc. como Linhas)**.
   - Selecione **Group By Concentration (Agrupar por Concentração)** para organizar os resultados em ordem de concentração na lista **Conc. as Rows (Conc. como Linhas)**.
   - Selecione **Group By Concentration (no All) (Agrupar por Concentração)** para organizar os resultados em ordem de concentração sem uma linha mostrando os dados estatísticos para cada grupo ou lote na lista **Conc. as Rows (Conc. como Linhas)**.

O software ordena os resultados. Ao final de cada lote ou grupo, uma ou duas linhas adicionais são mostradas: **All** (dados estatísticos para todas **Results Tables** naquele grupo) e **Average** (dados estatísticos para aquele lote ou grupo).

Software Reporter 12

O software Reporter aumenta a funcionalidade de relatórios disponível no software Analyst® .

O software Reporter pode ser usado para criar relatórios personalizados com o Microsoft Word e Excel (2007, 2010 ou 2013). O software Reporter possui as seguintes características:

- Fornece uma variedade de relatórios que usa os dados disponíveis em uma **Results Table** (Tabela de Resultados), na informação do arquivo e na janela de revisão do pico quantitativo.
- Utiliza modelos do Microsoft Word para fornecer o formato de informação necessário para gerar os relatórios. Estes modelos podem ser criados ou modificados para fornecer formatos de relatório personalizados. Consulte a Ajuda se você quiser criar ou editar modelos usando o **Report Template Editor** (Editor de Modelo de Relatório).
- Contém um modelo inicial branco que pode ser usado no ambiente de edição do software Reporter Analyst para criar modelos de relatórios para atingir a maioria das exigências de relatório.
- Imprime automaticamente, exporta para o Adobe Portable Document Format (pdf) e envia os resultados por e-mail. Esta funcionalidade exige o Save as PDF (Office 2007), que é instalado pelo softwareAnalyst.
- Cria relatórios a partir de aplicativos de software personalizados que utilizam os acervos de programação do software Analyst.

O software Reporter pode ser usado do seguinte modo:

- Dentro do software Analyst, para gerar manualmente um relatório ou um conjunto de relatórios.
- Por um script de listas de amostras para gerar o relatório automático dentro de uma lista. Os usuários podem gerar relatórios em uma base amostra por amostra, seja durante ou após a aquisição da lista.
- Aplicativos que não usam o software Analyst.

Interface do Usuário do Software Reporter

Figura 12-1 Software Reporter (Relatório)

Item	Opção	Descrição
1	**File (Arquivo) > Exit (Sair)**	Sai do programa e libera todos os recursos.
2	**Settings (Configurações) > Select Output Language (Selecionar Idioma de Saída)**	Define o dicionário do idioma que será usado para substituir as tags de idioma dentro de um modelo de relatório. Modelos que contêm tags de idioma podem ser usados para gerar relatórios em qualquer idioma. As tags de idioma são substituídas por texto de uma tag correspondente no arquivo do dicionário para o idioma selecionado. Estes arquivos de dicionários estão contidos na pasta: **C:\Program Files\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages**.
2	**Settings (Configurações) > Select Library (Selecionar Biblioteca)**	Navegue para a biblioteca do espectro. Esta biblioteca será usada para corresponder e marcar MS/MS a partir da **Results Tables (Tabela de Resultados)** que contém dados de aquisição dependentes de informação (IDA) ativada por tipos de varredura MS/MS.

Item	Opção	Descrição
2	**Settings (Configurações) > Select Template Folder (Selecionar Pasta do Modelo)**	Define a pasta da qual os modelos disponíveis serão lidos. Para retornar para a pasta de modelo padrão, selecione a opção **Default (Padrão)**.
3	**Help (Ajuda) > About (Sobre)**	Mostra as informações sobre a versão do software de relatório atualmente instalado.
4	Idioma de Saída Atual	Mostra o dicionário do idioma selecionado atualmente usado para substituir as tags de idioma dentro de um modelo de relatório. O dicionário de idioma pode ser selecionado utilizando **Settings (Configurações) > Select Output Language (Selecionar Idioma de Saída).**
5	Biblioteca do Espectro Atual	Mostra a biblioteca do espectro selecionada atualmente. A biblioteca do espectro pode ser selecionada utilizando **Settings (Configurações) > Select Library (Selecionar Biblioteca).**

Item	Opção	Descrição
6	Modelos Disponíveis e Descrição	Mostra uma lista de modelos de relatório disponíveis. Ao selecionar um modelo mostrará uma descrição do modelo. Para alterar a pasta onde os modelos disponíveis são lidos, selecione **Settings (Configurações) > Select Template Folder (Selecionar Pasta de Modelo) > Browse (Procurar).**
7	Formato de Saída	O software Reporter suporta diversos formatos de saída. Somente formatos que são compatíveis com o modelo de relatório selecionado estão habilitados. • Word: documento do Microsoft Word (. docx) é produzido. Este documento pode ser visto por Microsoft Word 2007 e superior. • PDF: A opção PDF cria um relatório diretamente em formato PDF. • HTML: Microsoft Word é usado para gerar um arquivo HTML. Arquivos de imagem associados são armazenados em uma pasta com o mesmo nome que o arquivo HTML. • Excel: Um arquivo de texto simples (.csv) é produzido. Os modelos de relatórios que contêm valores separados por vírgulas podem ser abertos no Microsoft Excel, onde cada valor será mostrado em uma célula separada. Apenas os modelos que são especificamente assinalados como compatíveis com texto podem ser utilizados para este formato de saída. • Texto: Um documento de texto simples (.txt) é produzido. Apenas os modelos que são especificamente assinalados como compatíveis com texto podem ser utilizados para este formato de saída. • Imprimir automaticamente: Depois que o relatório foi criado, ele é impresso na impressora selecionada. Selecione a partir de qualquer impressora disponível.

Gerar Relatórios

O software Reporter extrai os dados numéricos da **Results Table (Tabela de Resultados)** e informações de amostra e gráficas do arquivo .wiff.

Selecione um modelo no campo **Available Template (Modelo Disponível)**.

1. Abra uma **Results Table (Tabela de Resultados)**.
2. Abaixo de **Companion Software**, clique duas vezes em **Reporter**.

3. Na caixa de diálogo **Analyst Reporter**, no campo **Available Templates (Modelos Disponíveis)**, selecione um modelo.
4. Clique no formato de saída **PDF**.

   A opção **Word** está pré-selecionada e o relatório é automaticamente salvo na pasta **Results (Resultados)** do projeto atual. Se esta opção não estiver selecionada, então o relatório é criado e aberto em Word ou impresso, conforme selecionado, mas o relatório não é salvo. Isto permite ao usuário editar o relatório em Word antes de salvar o relatório original.
5. Selecione um documento contendo todas as amostras ou diversos documentos contendo uma amostra cada.
6. Selecione a caixa de verificação **Print Automatically (Imprimir Automaticamente)** para imprimir os relatórios automaticamente em uma impressora pré-selecionada.

   A configuração **Default Printer (Impressora Padrão)** no Windows é usada a menos que uma impressora diferente seja selecionada. A ferramenta Reporter contém a impressora selecionada entre as operações. Se a impressora estiver configurada em um driver de impressão .pdf, então o Reporter gera versões em arquivo .PDF dos relatórios criados automaticamente.
7. Clique em **Create Report (Criar Relatório)**.

   A tela mostra diversos indicadores de progresso, pois a ferramenta abre o modelo e preenche o mesmo com dados da **Results Table (Tabela de Resultados)**. Alguns relatórios podem levar segundos para serem gerados, outros podem demorar mais. Um grande conjunto de dados com muitas transições de MRM ou um grande número de gráficos pode resultar em relatórios com diversas centenas de páginas que podem levar horas para serem gerados.

Informações sobre Serviço e Manutenção 13

Faça a limpeza e a manutenção regularmente para o desempenho ideal do sistema. Consulte *Tabela 13-1* para informações sobre ajuste da frequência.

ADVERTÊNCIA! Risco de Radiação, Risco Biológico, Produto Químico Tóxico: Determine se a descontaminação do espectrômetro de massas é necessária antes da limpeza ou manutenção. A descontaminação deve ser realizada antes da limpeza caso materiais radioativos, agentes biológicos ou produtos químicos tóxicos tenham sido usados com o espectrômetro de massas.

Cronograma Recomendado de Limpeza e Manutenção

Tabela 13-1 fornece um cronograma recomendado para a limpeza e a manutenção do sistema. Entre em contato com uma Pessoa de Manutenção Qualificada (QMP) para solicitar peças de consumo. Entre em contato com um representante da AB SCIEX para o serviço e suporte da manutenção.

Tabela 13-1 Tarefas de Manutenção

Componente	Frequência	Tarefa	Para mais informações...
Curtain plate	Diária	Limpar	Consulte *Limpar a Curtain Plate na página 133*.
Orifice plate (frente)	Diária	Limpar	Consulte *Limpar a Orifice Plate na página 133*.
Orifice plate (frente e parte posterior)	Conforme necessário	Limpar	Contate o QMP local ou o Engenheiro de Serviço (FSE) da AB SCIEX.
Lentes Q0 e IQ1	Conforme necessário	Limpar	Contate o QMP local ou FSE.
Superfícies do instrumento	Conforme necessário	Limpar	Consulte *Limpar as Superfícies na página 129*.
Frasco do dreno	Conforme necessário	Vazio	Consulte *Esvazie o frasco de drenagem de exaustão da fonte*.
Óleo da bomba de vácuo mecânica	Conforme necessário	Verificar e encher	Contate o QMP local ou FSE.

Tabela 13-1 Tarefas de Manutenção (continuação)

Componente	Frequência	Tarefa	Para mais informações...
Filtro de ar do instrumento	A cada 6 meses	Inspecione e limpe ou substitua	Contate o QMP local ou FSE.
Eletrodos TIS e APCI	Conforme necessário	Inspecione e limpe ou substitua	Consulte o *Guia de Operação* da fonte de íons.
Agulha de descarga de corona	Conforme necessário	Substituir	Consulte o *Guia de Operação* da fonte de íons.

Para as tarefas “Conforme necessário”, siga estas diretrizes:

- Limpe a guia de íonsQJet® e a região Q0, se a sensibilidade do sistema diminuir.

  Dica! Limpe a região Q0 regularmente para reduzir o impacto da descarga (uma perda significativa da sensibilidade dos íons de interesse ao longo de um curto período de tempo) nos quadrupolos e lentes. Contate um QMP ou FSE da AB SCIEX.

- Limpe as superfícies do espectrômetro de massas após um derramamento ou quando ficarem sujas.
- Esvazie o frasco do dreno quando ele estiver cheio.

Limpar as Superfícies

Limpe as superfícies externas do espectrômetro de massas após um derramamento ou quando ficarem sujas.

ADVERTÊNCIA! Risco biológico, Risco de Produtos Químicos Tóxicos: Tome todas as precauções de segurança apropriadas quando limpar o óleo da bomba de vácuo mecânica vazado ou derramado. Siga os procedimentos de controle de derramamento adequados.

1. Limpe as superfícies externas com um pano macio e umedecido com água morna e sabão.
2. Limpe as superfícies externas com um pano macio e umedecido com água para remover qualquer resíduo de sabão.

Limpar a Parte Frontal

Limpe a parte frontal do espectrômetro de massas usando o método de limpeza de rotina, para:

- Reduzir o tempo ocioso não agendado do sistema.
- Manter a sensibilidade ideal.
- Evitar a limpeza mais excessiva, que precisa de uma visita de serviço.

Quando ocorrer contaminação, realizar uma limpeza de rotina inicial. Limpar até e incluir a frente da orifice plate. Se a limpeza de rotina não resolver os problemas com a sensibilidade, uma limpeza completa pode ser necessária.

Esta seção fornece instruções para realizar a limpeza de rotina sem interromper o vácuo e a limpeza completa em pressão atmosférica, após ventilar o espectrômetro de massas.

Nota: Siga todas as regulamentações locais aplicáveis. Para diretrizes de saúde e segurança, consulte *Precauções Químicas na página 10*.

Sinais de Contaminação

O sistema pode estar contaminado se qualquer um destes itens for observado:

- Perda significativa na sensibilidade
- Aumento do ruído de fundo
- Aparecimento de picos interferentes na amostra em métodos de varredura ou métodos de varredura ou de seleção de íons.

Se você observar qualquer um desses problemas, limpe a interface do espectrômetro de massas.

Materiais necessários

- Luvas sem talco (recomendado neoprene)
- Óculos de segurança
- Jaleco
- Água de alta qualidade e recém coletada em sistema de ultrapurificação (18 MΩ deionizada [DI] ou de grau HPLC). A utilização de água purificada em outro dia poderá conter contaminantes para o espectrômetro de massas.
- Metanol, isopropanol (2-propanol) ou acetonitrila grau MS
- Solução de limpeza. Use um dos solventes ou soluções abaixo:
  - metanol 100%
  - isopropanol 100%
  - solução de acetonitrila:água 50:50 (recém preparada)
  - solução acetonitrila:água, 50:50, com 0,1% de ácido acético (recém preparada)
- Limpe um béquer de vidro de 1 L ou 500 mL para preparar as soluções de limpeza
- Béquer de 1 L para coletar o solvente usado
- Recipiente de descarte orgânico
- Lenços sem fiapos. Consulte *Ferramentas e suprimentos disponibilizados pelo fabricante na página 131*.
- (Opcional) Cotonete de limpeza

Ferramentas e suprimentos disponibilizados pelo fabricante

Descrição	Número da peça
Swab de poliéster pequeno (ligação térmica). Disponível no kit de limpeza.	1017396
Lenço sem fiapos (11 cm x 21 cm; 4,3 polegadas x 8,3 polegadas). Disponível no kit de limpeza.	018027
Ferramenta de limpeza das hastes de Q0. Disponível no kit de limpeza.	1028234
Escova de limpeza da Guia de Íons (reta) QJet® . Disponível no kit de limpeza.	5020894
Pacotes de Alconox. Disponível no kit de limpeza.	5020893
Kit de limpeza. Contém: Swab pequeno de poliéster, lenço sem fiapos, ferramenta para limpeza de Q0, escova de limpeza de QJet® e pacotes de Alconox.	5020761

Boas Práticas

ADVERTÊNCIA! Risco de Produto Químico Tóxico: Siga todas as orientações de segurança ao manusear, armazenar e descartar os produtos químicos.

ADVERTÊNCIA! Risco de Radiação, Risco Biológico, Produto Químico Tóxico: Determine se a descontaminação do espectrômetro de massas é necessária antes da limpeza ou manutenção. A descontaminação deve ser realizada antes da limpeza caso materiais radioativos, agentes biológicos ou produtos químicos tóxicos tenham sido usados com o espectrômetro de massas.

ADVERTÊNCIA! Risco Ambiental: Não descarte os componentes do sistema no lixo comum. Siga os procedimentos adequados quando descartar os componentes.

- Sempre use luvas limpas e sem talco para os procedimentos de limpeza.
- Depois de limpar os componentes do espectrômetro de massas e antes de recolocá-los, coloque luvas novas e limpas.
- Não use suprimentos de limpeza diferentes dos especificados neste procedimento.
- Se possível, prepare soluções de limpeza imediatamente antes de começar a limpeza.
- Prepare e armazene todas as soluções orgânicas e soluções contendo elementos orgânicos somente em vidraria muito limpa. Nunca use frascos plásticos. Os contaminantes podem migrar a partir desses frascos e, assim, contaminar o espectrômetro de massas.
- Deixe somente a área central do lenço entrar em contato com a superfície do espectrômetro de massas. Corte as bordas para descartar as fibras.

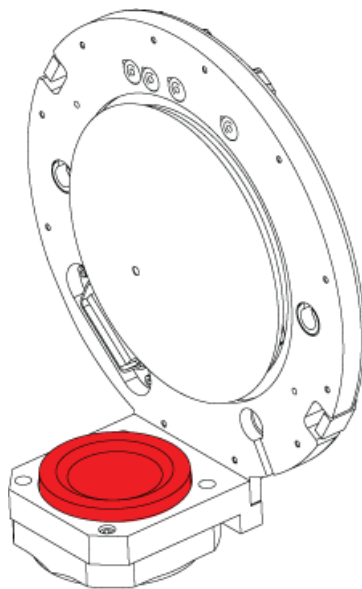
- Para evitar contaminação cruzada, descarte o lenço ou swab depois que ele entrou em contato com a superfície.
- Partes maiores da interface de vácuo, tal como a curtain plate, podem exigir várias limpezas, utilizando múltiplos lenços.
- Para evitar a contaminação da solução de limpeza, despeje a solução sobre o lenço ou swab.
- Só umedeça levemente o lenço ou swab aplicando água ou solução de limpeza. Água, mais frequentemente do que os solventes orgânicos, pode deteriorar o lenço, deixando resíduo no espectrômetro de massas.
- Não esfregue o lenço sobre o orifício. Limpe apenas ao redor do orifício para evitar que as fibras dos lenços entrem no espectrômetro de massas.

Preparar o espectrômetro de massas

1. Desative o perfil no hardware. Consulte o *Guia do Usuário do Sistema*.
2. Remova a fonte de íons.

CUIDADO: Danos potenciais ao sistema: não deixe que nada caia ou goteje sobre o dreno enquanto a fonte de íons estiver removida.

Quando a fonte de íons não estiver em uso, armazene-a para protegê-la do dano e para manter a integridade de funcionamento.

Figura 13-1 Dreno da Fonte na Interface a Vácuo

Limpar a Curtain Plate

CUIDADO: Danos potenciais ao sistema: não repouse a curtain plate ou a orifice plate com o orifício voltado para baixo. Certifique-se de que o lado cônico da curtain plate esteja voltado para cima.

1. Remova a curtain plate e, em seguida, coloque-a, com a parte cônica voltada para cima, em uma superfície limpa e estável.
2. Umedeça um lenço livre de fiapos com água purificada e, em seguida, limpe ambos os lados da curtain plate. Use múltiplos lenços, conforme necessário.
3. Repita a etapa 2 usando a solução de limpeza.
4. Usando um lenço umedecido ou um pequeno swab de poliéster, a área do orifício.
5. Aguarde até que a curtain plate esteja seca.
6. Inspecione a curtain plate quanto a manchas do solvente ou fiapos, removendo qualquer resíduo com um lenço sem fiapos, limpo e ligeiramente umedecido.

Nota: A formação de manchas persistentes é um indicador de solvente contaminado.

Limpar a Orifice Plate

Ao limpar a orifice plate padrão com o aquecedor de interface removível, não remova o aquecedor de interface. A limpeza de superfície do aquecedor de interface é adequada para a limpeza de rotina.

CUIDADO: Danos potenciais ao sistema: não introduza um fio ou uma escova no orifício da curtain plate, orifice plate, aquecedores.

Ligar o Espectrômetro de Massas Novamente

1. Instale a curtain plate no espectrômetro de massas.
2. Instale a fonte de íons no espectrômetro de massas.
3. Ative o perfil no hardware.

Esvazie o frasco de drenagem de exaustão da fonte

Esvazie o frasco de drenagem de exaustão da fonte antes que encha por completo.

ADVERTÊNCIA! Risco de Radiação, Risco Biológico, Produto Químico Tóxico: Deposite materiais perigosos em recipientes apropriadamente rotulados. Risco potencial de lesão pessoal se os procedimentos adequados para o manuseio e descarte de produtos químicos não forem seguidos.

1. Remova a fonte de íons. Consulte o *Guia de Operação* da fonte de íons.
2. Solte os grampos que conectam as mangueiras à tampa do frasco de drenagem de exaustão da fonte.
3. Desconecte as mangueiras da tampa.
4. Se aplicável, levante o frasco de drenagem para fora do suporte.
5. Remova o frasco de drenagem da tampa.
6. Esvazie o frasco de drenagem e, em seguida, descarte os resíduos.
7. Instale a tampa no frasco e coloque o frasco no suporte.
8. Fixe as mangueiras à tampa e prenda-as firmemente com os grampos.

Figura 13-2 Frasco de drenagem do exaustor da fonte

Item	Descrição
1	Conexão para exaustão
2	Tubo de drenagem do exaustor da fonte: 2,5 cm (1,0 polegada) de diâmetro interno (d.i.)
3	Mangueira de exaustão da bomba de vácuo mecânica: 3,2 centímetros (1,25 polegadas) d.i.
4	Frasco de drenagem de exaustor da fonte (Neste desenho, o frasco de drenagem tampado é mostrado na parte de trás do espectrômetro de massas para tornar visíveis os pontos de conexão.O frasco de drenagem pode estar localizado ao lado do espectrômetro de massas no suporte do frasco de drenagem. Certifique-se de que o frasco está protegido para evitar derramamento.)
5	Conexão com espectrômetro de massas: 1,6 cm (0,625 polegada) d.i.

Armazenamento e Manuseio

ADVERTÊNCIA! Risco Ambiental: Não descarte os componentes do sistema no lixo comum. Siga os procedimentos adequados quando descartar os componentes.

Se o espectrômetro de massas precisar ser armazenado por um longo período ou preparado para remessa, entre em contado com um FES da AB SCIEX para informações de desativação do equipamento. Para desconectar a energia do espectrômetro de massas, remova o conector de alimentação elétrica da alimentação elétrica AC.

Nota: O sistema deve ser transportado e armazenado entre –30°C a +60°C (-22°F a 140°F). Armazene o sistema abaixo de 2000 m (6562 pés) acima do nível do mar.

Solução de Problemas 14

Este capítulo contém informações básicas para a solução de problemas do sistema básico. Determinadas atividades podem ser realizadas pela Pessoa de Manutenção Qualificada (PGQ) treinada pela AB SCIEX no laboratório. Para solução de problemas mais avançados, entre em contato com um Engenheiro de Serviço (FSE).

Tabela 14-1 Problemas do Sistema

Sinal	Causa possível	Ação Corretiva
Perda de sensibilidade	Instrumento ou fonte de íons exigem ajuste e otimização	Consulte *Instruções de operação - Ajustar e Calibrar na página 47*.
	Curtain plate suja	Consulte *Limpar a Curtain Plate na página 133*.
	Orifice plate suja	Consulte *Limpar a Orifice Plate na página 133*.
	QJet®Guia de íons, separador, Q0 ou IQ0	Entre em contato com um FSE ou QMP local.
Contaminação frequente ou extrema da Guia de íons QJet	Gás de cortina™vazão (CUR) é muito baixa.	Verifique a configuração para o parâmetro CUR e aumente o mesmo, se aplicável.
Pressão a vácuo baixa	Nível baixo de óleo na bomba de vácuo mecânica.	Confirme o nível de óleo da bomba de vácuo mecânica e adicione óleo se necessário. Entre em contato com um FSE ou QMP local.

Para vendas, assistência técnica ou serviço, entre em contato com um FSE ou visite o site da AB SCIEX em www.absciex.com para informações de contato.

Instruções de Operação - Otimização Manual

O usuário deve controlar o autoamostrador e a válvula de injeção manualmente, pois estes dispositivos não podem ser controlados pelo sistema durante o modo de **Tune and Calibrate** (Ajustar e Calibrar).

Pré-requisitos
• O espectrômetro de massas é ajustado e calibrado. • As condições para uma separação LC são desconhecidas. • Todos os dispositivos periféricos necessários, incluindo uma bomba de seringa, se necessária, e os componentes LC estão no perfil do hardware.

Materiais necessários
Para ajustar os parâmetros do instrumento para os compostos particulares, as seguintes etapas são recomendadas. A mistura dos quatro compostos é usada para ilustração das etapas do procedimento. • Fase móvel: 1:1 de acetonitrila:água + 2 mM de acetato de amônio + ácido fórmico a 0,1%. • Bomba LC e autoamostrador. • Frascos do autoamostrador. • Mistura de quatro compostos (50 ng/mL), consistindo de reserpina, minoxidil, tolbutamida e rescinamina. Use uma solução que seja 49,9% de acetonitrila, com 50% de água deionizada e 0,1% de ácido fórmico como diluente. Outros compostos podem ser substituídos desde que seu peso molecular seja conhecido e o composto seja razoável para ser ionizado por uma fonte API (Ionização por Pressão Atmosférica).

Tabela A-1 Compostos e Pesos Moleculares

Composto	***m/z***
Minoxidil	210,2
Tolbutamida	271,1
Reserpina	609,3
Rescinamina	635,3

Sobre a otimização manual do composto

A otimização manual do composto é usada para melhorar os parâmetros dependentes de composto e fonte de íons de um analito. Quando o usuário otimiza de forma manual para um analito, um método de aquisição MS é criado no modo **Tune and Calibrate** (Ajustar e Calibrar). Dependendo do método de introdução da

amostra selecionado, adicionar um método LC ao método de aquisição, de forma que a infusão ou LC possa ser usado.

Otimizar para fornecer o sinal mais alto nem sempre fornece as maiores razões entre sinal e ruído. O ruído pode aumentar com o sinal para alguns parâmetros e deve ser verificado durante a otimização se o objetivo for obter a razão entre ruído e sinal máxima.

Quando otimizar os parâmetros dependentes de fonte de íons, introduza a amostra em uma taxa de vazão que será usada durante a análise da amostra, usando FIA ou infusão em T como o método de introdução da amostra. O gás CAD é o único parâmetro dependente do composto que é mostrado na aba **Source/Gas** (Fonte/Gás) e pode ser facilmente otimizado enquanto é realizada a infusão do analito.

Otimizar a posição da fonte de íons antes de otimizar os parâmetros dependentes da fonte de íons. Consulte o *Guia de Operação da Fonte de Íons*.

Sobre os Tipos de Varredura

Para este exemplo, use os tipos de varredura **Q1 MS**, **Q1 MI**, **Product Ion (Íon Produto)** e **MRM**. O tipo de varredura **Q1 MS** é usado para confirmar a presença de compostos de interesse. A varredura **Q1 MI** é usada para otimizar o MS ou as voltagens das células antes da colisão. O tipo de varredura **Product Ion (Íon Produto)** é usado para determinar os íons produto de cada composto. O tipo de varredura **MRM** é usado para otimizar a energia de colisão (CE) e o potencial de saída da célula de colisão (CXP) para cada íon produto ou fragmento. Use os métodos criados nesta seção para uma análise quantitativa ou qualitativa.

Otimizar um Analito Manualmente

Após o método de aquisição ser criado, otimize os parâmetros dependentes do composto usando a função **Edit Ramp** (Editar Rampa) ou editando manualmente os parâmetros no **Tune Method Editor** (Editor do Método de Ajuste). Os parâmetros dependentes da fonte de íons podem ser otimizados apenas por ajuste manual dos parâmetros no **Tune Method Editor** (Editor do Método de Ajuste). Dependendo do tipo de varredura usado, diferentes parâmetros estão disponíveis para otimização.

Siga os procedimentos nesta ordem:

1. *Confirmar a Presença dos Compostos na página 138*
2. *Otimizar os Parâmetros Específicos de MS na página 140*
3. *Determine os Íons Produto para Otimização na página 141*
4. *Otimizar o Potencial de Saída da Célula de Colisão para cada íon produto na página 143*

Confirmar a Presença dos Compostos

1. Crie um projeto.
2. Ative o perfil no hardware.
3. Realize a infusão do composto em solução na taxa de 5 µL/min a 10 µL/min.

4. Na barra de navegação, em **Tune and Calibrate** (Ajustar e Calibrar), clique duas vezes em **Manual Tuning** (Ajuste Manual).
5. Na aba **Syringe Pump Method Properties** (Propriedades do Método da Bomba da Seringa), digite os parâmetros mostrados na *Tabela A-2*.

Tabela A-2 Aba de Propriedades do Método da Bomba da Seringa

Parâmetro	Valor
Diâmetro da Seringa	Seringa dependente: seringa de 1,0 mL possui 4,610 mm
Taxa de Vazão	10
Unidade	µL/min

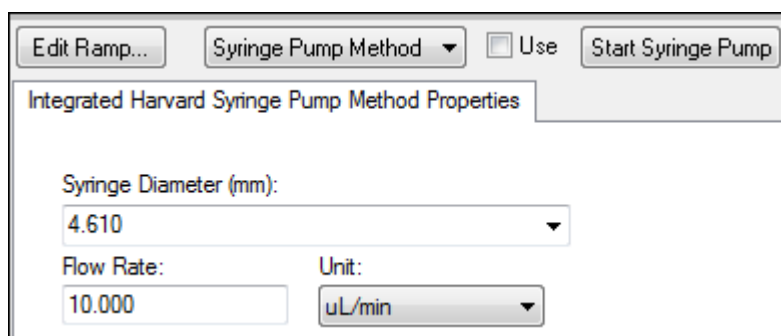
Figura A-1 Aba de Propriedades do Método da Bomba da Seringa

6. Clique em **Start Syringe Pump** (Iniciar Bomba da Seringa).
7. Clique em **MS Method** (Método MS) a partir da lista do método.
8. Na aba **MS**, digite os parâmetros mostrados na *Tabela A-3*.

Tabela A-3 Aba MS

Parâmetro	Valor
Tipo de varredura	Q1 MS (Q1)
Início (Da)	200
Término (Da)	700
Taxa de varredura (Da/s) (se disponível)	200
Duração (min)	3

9. Clique em **Start** (Iniciar).

10. Aguarde até que um TIC uniforme seja mostrado à esquerda e os picos sejam mostrados à direita e então clique em **Stop** (Parar).
11. Selecione a caixa de verificação **MCA**.
12. Digite **10** no campo **Cycles** (Ciclos).
13. Clique em **Start** (Iniciar).
14. Quando as dez varreduras forem concluídas, as massas dos quatro compostos são mostradas como íons.

    As intensidades do íon dos compostos podem mostrar grande variação. Para facilitar mover de uma solução de concentração alta para baixa, conforme necessário durante a otimização, tenha diversos níveis de concentração preparados antes de iniciar a otimização.
15. Clique com o botão direito no canto inferior direito do painel espectral e depois clique em **Open File** (Abrir Arquivo).
16. Encontre os compostos de interesse e depois escreva os valores *m/z* para os maiores picos. Estes valores devem estar dentro de 0,1 Da a 0,2 Da do *m/z* esperado. No próximo procedimento, utilize valores *m/z*.

Otimizar os Parâmetros Específicos de MS

O parâmetro DP é a diferença entre o orifício e o aterramento. Quanto maior a diferença do potencial, maior a quantidade de desagregação.

O parâmetro DP possui um efeito significativo no sinal do analito. Os valores típicos de DP variam de 20 V a 150 V. Se o valor de DP for muito baixo, isto resultará em uma intensidade iônica menor e potenciais interferências dos agrupamentos. Se o valor de DP for muito alto, isto causa a fragmentação do analito na fonte. Geralmente, o DP deve ser configurado com o valor que fornece a maior intensidade.

O parâmetro de EP controla o potencial de entrada, que guia e foca os íons pela região Q0 de alta pressão. É tipicamente configurado em 10V para os íons positivos ou -10V para os íons negativos. O EP possui um efeito mínimo na otimização do composto e, portanto, pode geralmente ser deixado com os valores padrão sem impacto nos limites de detecção do analito.

1. Retorne ao **Tune Method Editor** (Editor do Método de Ajuste) e altere o método para o tipo de varredura **Q1 Multiple Ions (Q1 MI) (Múltiplos Íons Q1)**.
2. Na tabela de massa, digite os parâmetros mostrados na *Tabela A-4*.

Tabela A-4 Parâmetros da Tabela de Massa - Múltiplos Íons Q1 (Q1 MI)

Composto	Massa Q1	Tempo
Reserpina	609,3	1
Minoxidil	210,2	1
Tolbutamida	271,1	1
Rescinamina	635,3	1

Inicie com a reserpina como exemplo. Repita o processo de otimização manual para os compostos restantes.

3. Clique em **Edit Ramp** (Editar rampa).
4. Selecione **Declustering Potential (DP)** na caixa de diálogo **Ramp Parameter Settings** (Configurações do Parâmetro de Rampa).

Nota: Comece com o parâmetro DP e depois otimize os outros parâmetros na ordem que eles aparecerem na caixa de diálogo. Os parâmetros podem não ser corretamente otimizados se eles forem otimizados fora de ordem.

5. Digite os valores necessários de **Start** (Iniciar), **Stop** (Parar) e **Step** (Etapa). Os valores existentes são bons pontos de início. Use a função **Edit Ramp** (Editar Rampa) para mudar estes valores para serem mais eficientes.
6. Clique em **OK**.
7. Clique em **Start** (Iniciar).
8. Clique com o botão direito no canto inferior direito do painel XIC e depois clique em **Open File** (Abrir Arquivo) para maximizar a visualização do XIC.
9. Monitore os XICs. O valore que fornece o melhor sinal por segundo para o íon de interesse é o valor ideal.
10. Anote o valor ideal para o íon de interesse.
11. Mova o cursor para a tabela de massa, clique com o botão direito e adicione o parâmetro recém-otimizado. Isto adiciona uma coluna à tabela.
12. Adicione o valor otimizado na linha apropriada.
13. Repita estas etapas para cada massa no método de aquisição até que você tenha uma lista dos valores ideais para todas as massas.
14. Repita estas etapas para otimizar outros parâmetros específicos de MS.

Tabela A-5 Parâmetros Específicos de MS

Parâmetro	Comentário
DP	Configura o DP ao valor que fornece a maior intensidade.
EP	Raramente otimize este parâmetro, pois possui o menor efeito.

Determine os Íons Produto para Otimização

A energia de colisão (CE) controla a quantidade de energia que os íons precursores recebem conforme são acelerados dentro da célula de colisão.

Realize este procedimento, um composto de cada vez, usando os valores específicos otimizados para MS que foram obtidos anteriormente. Os íons produto fornecem a massa Q3 de transições MRM.

Neste exemplo, o composto reserpina é usado.

1. No **Tune Method Editor (Editor do Método de Ajuste)**, feche os painéis XIC.
2. Clique em **Product Ion (MS2) (Íon Produto)** no campo **Tipo de Varredura**
3. Selecione a aba **Compound (Composto)** e depois digite os valores ideais anotados anteriormente.
4. Na aba **MS** no campo **Product Of (Produto de)**, digite **609,4**. Este valor é a atribuição de massa para reserpina que foi observado em *Confirmar a Presença dos Compostos na página 138*.
5. Certifique-se que a caixa de seleção **Center/Width (Centro/Largura)** não está selecionada.
6. Na tabela de massa, digite o seguinte:

Tabela A-6 Parâmetros da Tabela de Massa (Varredura Íon Produto)

Campo	Valor
Início (Da)	100
Término (Da)	650
Tempo (seg)	2

7. Clique em **Edit Ramp (Editar Rampa)**.
8. Na caixa de diálogo **Ramp Parameter Settings (Configurações do Parâmetro da Rampa)**, selecione **Collision Energy (Energia de Colisão)** e depois digite os valores **Start (Iniciar)**, **Stop (Parar)** e **Step (Etapa)** necessários. Os valores existentes são bons pontos de início. Use a função **Edit Ramp (Editar Rampa)** para mudar estes valores para serem mais eficientes.
9. Clique em **OK**.
10. Selecione a caixa de seleção **MCA**.
11. Clique em **Start (Iniciar)**.
12. Clique com o botão direito no canto inferior do painel XIC e depois clique em **Open File (Abrir Arquivo)**.
13. Selecione os Íons produto com maior intensidade. Observe o íon produto *m/z* para a primeira casa decimal, como 195,1.

    O fabricante recomenda que dois ou três íons produto sejam otimizados para cada composto. As transições adicionais podem ser utilizadas para confirmação ou para evitar a necessidade de otimizar novamente um composto caso uma interferência seja encontrada.

    Nota: Certifique-se que os picos mais altos selecionados para otimização não representam uma perda comum a partir do íon precursor, tal como água ou dióxido de carbono. Também certifique-se que o íon produto não está muito baixo em massa ou interferências para que a transição em amostras reais ou agrupamentos a partir da fase móvel ao analisar a coluna possam ocorrer.

14. Repita este procedimento para os compostos restantes.

Otimizar o Potencial de Saída da Célula de Colisão para cada íon produto

1. No **Tune Method Editor (Editor do Método de Ajuste)**, feche os painéis XIC.
2. Abra o método salvo anteriormente.
3. Na tabela de massa, verifique os valores *m/z* Q1 e Q3 para o composto.
4. Selecione a aba **Compound** (Composto) e depois digite os valores ideais de DP e CE anotados anteriormente.
5. Clique em **Edit Ramp** (Editar Rampa).
6. Na caixa de diálogo **Ramp Parameter Settings** (Configurações do Parâmetro de Rampa), selecione **Collision Cell Exit Potential (CXP)** (Potencial de Saída da Célula de Colisão) e depois digite os valores **Start** (Iniciar), **Stop** (Parar) e **Step** (Etapa) necessários. Os valores existentes são bons pontos de início. Use a função **Edit Ramp** (Editar Rampa) para mudar estes valores para serem mais eficientes.
7. Clique em **OK** e depois clique em **Start** (Iniciar).
8. Clique com o botão direito no canto inferior do painel XIC e depois clique em **Open File** (Abrir Arquivo).
9. Anote o valor ideal para o íon de interesse.

   O valor que fornece o melhor sinal é o valor ideal.
10. Na tabela de massa, clique com o botão direito e selecione o parâmetro recém-otimizado. Isto adiciona uma coluna à tabela.
11. Repita se os íons produto foram monitorados.
12. Adicione os valores ideais na linha apropriada.
13. Salve o método.
14. Repita para os outros compostos se otimizados anteriormente.

Otimize manualmente a Fonte de Íons e os Parâmetros de Gás

A fonte de íon e as configurações de gás devem ser definidas corretamente para certificar que o espectrômetro de massas fique limpo e que os compostos de interesse foram otimamente transferidos para a fase gasosa.

A fonte de íons e as configurações de gás devem ser ajustadas quando as condições LC mudarem significativamente.

Para otimizar a fonte de íons e os parâmetros de gás, instale uma bomba de seringa com os compostos de interesse e conecte a linha com um T ao dispositivo LC. O controle da bomba pode ser feito manualmente ou por meio de software.

Outra forma de otimizar manualmente a fonte de íons e as configurações de gás é utilizar o autoamostrador para injetar manualmente o composto de interesse, enquanto varia manualmente os parâmetros no ajuste manual para encontrar as configurações ideais.

Preparar a Fonte de Íons

1. Configure o micrômetro horizontal em 5 mm.
2. Configure o micrômetro vertical na fonte de íons para a taxa de vazão.

   Use os parâmetros na *Tabela A-7*. Consulte o *Guia de Operação da Fonte de Íons*.

   Tabela A-7 Parâmetros Verticais da Fonte de Íons Turbo V

Taxa de Vazão	Parâmetros verticais iniciais
1 µL/min a 20 µL/min	10 mm
20 µL/min a 250 µL/min	5 mm
250 µL/min a 500 µL/min	2 mm
500 + µL/min	0 mm

   Dependendo de como a otimização será realizada, um perfil do hardware com as bombas LC pode precisar ser configurado.

Otimize os Parâmetros da Fonte de Íons

Parâmetros da fonte de íons são otimizados para melhor razão sinal/ruído para o composto de interesse. A **Curtain Gas** ™é otimizada na mais alta configuração sem perder a sensibilidade. Consulte o *Guia de Operação da Fonte de Íons*.

Use o seguinte procedimento para otimizar o parâmetro da interface **Curtain Gas**. A principal função do parâmetro da interface **Curtain Gas** é evitar a contaminação da óptica iônica. O parâmetro da interface **Curtain Gas** deve sempre ser mantido o mais alto possível, sem perda de sensibilidade. O valor depende do tipo de espectrômetro de massas e fonte de íons.

Não defina o parâmetro abaixo do valor inicial.

1. Na barra de navegação, em **Tune and Calibrate (Ajustar e Calibrar)**, clique duas vezes em **Manual Tuning (Ajuste Manual)**.
2. Clique em **File (Arquivo) > Open (Abrir).**
3. Na lista **Files (Arquivos)**, clique no método de aquisição usado para otimizar o parâmetro de composto e, em seguida, clique em **OK**.

   O método abre no **Tune Method Editor (Editor de Método de Ajuste)**.
4. Clique na aba **Source/Gas (Fonte/Gás)**.
5. Usando a fonte de íons e guia do fluxo de gás, defina todos os parâmetros da fonte de íons e gás, de modo que eles sejam apropriados para a vazão.
6. Defina o tempo de execução longo o suficiente de forma que muitos parâmetros possam ser ajustados. Um bom tempo inicial é de 15 minutos.
7. Clique em **Start (Iniciar)**.

Os dados são apresentados nos painéis abaixo de **Tune Method Editor (Editor de Método de Ajuste)**.

8. Anote o sinal do pico de interesse.
9. No campo **Curtain Gas (CUR)**, aumente o valor em cinco vezes.
10. Continue aumentando o valor de interface de **Curtain Gas** até o valor mais alto sem perder a sensibilidade. Tal como acontece com a maioria dos parâmetros **Source/Gas (Fonte/Gás)**, se dois valores derem o mesmo resultado, então use o valor mais alto.
11. Repita este procedimento para os outros parâmetros **Source/Gas (Fonte/Gás)**. Ao otimizar para esses parâmetros, procure o valor que dá o valor mais alto para sinal/ruído.

Lista dos Componentes de Remessa

B

Componentes de Remessa

Tabela B-1 espectrômetro de massas

Número da peça	Descrição	Quantidade
5014688	Bomba de vácuo mecânica SV 28	1
1026571	Cabo de Ethernet, cruzado CAT 5, 10 ft	1
014461	Cabo, moldado, INST/NEMA 6	1
1002277	Cabo Auxiliar I/O (opcional)	1
5021072	Frasco de resíduos do exaustor de 4L	1
5021296	Tampa de abertura/enchimento	1
5021495	Mangueira do exaustor, ondulada, 1 polegada de diâmetro interno (d.i.) x 1 polegada de diâmetro externo (d.e.), 60 polegadas	1
5021493	Mangueira do exaustor, ondulada, 0,625 polegadas de diâmetro interno d.i. x 1 polegada de diâmetro externo d.e., 60 polegadas	1
5021142	Braçadeira de aço inoxidável, de 0,5 polegada a 0,906 polegada de diâmetro	1
5021232	Braçadeira de aço inoxidável, de 0,688 polegada a 1,25 polegadas de diâmetro	1
5029690	Tubo de Teflon, de 0,25 polegada d.i. x 0,125 polegada d.e., 3.048 centímetros (100 pés)	1
1004318	Montagem de tubo de 3 vias, 6,4 mm	1
019176	Porca sextavada, aço inoxidável de 0,25 polegadas	5
019178	Braçadeira e tubulação, 0,25 polegada d.e.	5

Tabela B-2 Computador

Número da peça	Descrição	Quantidade
5031431	Dell OptiPlex 9010, Windows 7 (32-bit)	1
5025243	Disco de recuperação	1
5029882	Monitor LCD Dell 23" Wide Ultrasharp	1

Parâmetros para os Instrumentos AB SCIEX Triple Quad 3500 C

A seguinte tabela contém parâmetros genéricos para o instrumento AB SCIEX Triple Quad 3500. O primeiro número de cada tipo de varredura é o valor pré-definido. A variação dos números é o intervalo acessível para cada parâmetro.

Tabela C-1 Parâmetros do Sistema para os Tipos de varredura Quadrupolo Triplo

ID de Acesso	Modo de Íon Positivo			Modo de Íon Negativo		
	Q1	**Q3**	**MS/MS**	**Q1**	**Q3**	**MS/MS**
CUR(1)(2)	10 10 a 55	10 10 a 55	10 10 a 55	10 10 a 55	10 10 a 55	10 10 a 55
CAD	0 Fixo	5 Fixo	9 0 a 12	0 Fixo	5 Fixo	9 0 a 12
IS(1)(2)	5500 0 a 5500	5500 0 a 5500	5500 0 a 5500	–4500 –4500 a 0	–4500 –4500 a 0	–4500 –4500 a 0
NC(3)	3 0 a 5	3 0 a 5	3 0 a 5	–3 –5 a 0	–3 –5 a 0	–3 –5 a 0
TEM(2)(3)	0 0 a 750	0 0 a 750	0 0 a 750	0 0 a 750	0 0 a 750	0 0 a 750
DP	130 0 a 300	130 0 a 300	120 0 a 300	–60 –300 a 0	–60 –300 a 0	–150 –300 a 0
EP	10 2 a 15	10 2 a 15	10 2 a 15	–10 –15 a –2	–10 –15 a –2	–10 –15 a –2
CEM	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300
GS1	15 0 a 90	15 0 a 90	15 0 a 90	15 0 a 90	15 0 a 90	15 0 a 90
GS2	0 0 a 90	0 0 a 90	0 0 a 90	0 0 a 90	0 0 a 90	0 0 a 90

Tabela C-1 Parâmetros do Sistema para os Tipos de varredura Quadrupolo Triplo (continuação)

ID de Acesso	Modo de Íon Positivo			Modo de Íon Negativo		
IQ1 (IQ1 = Q0 + deslocamento)	Q0 + (–0,5)	Q0 + (–0,5)	Q0 + (–0,5)	Q0 + 0,5	Q0 + 0,5	Q0 + 0,5
ST (ST = Q0 + deslocamento)	Q0 + (–8) –12 a –5	Q0 + (–8) –12 a –5	Q0 + (–8) –12 a –5	Q0 + 8 12 a 5	Q0 + 8 12 a 5	Q0 + 8 12 a 5
IE1 (IE1 = Q0 – RO1)	0,9 0 a 3	n/a	0,9 0 a 3	–1 –3 a 0	n/a	–1 –5 a 0
CE (CE = Q0 - RO2)	n/a	n/a	53 5 a 180	n/a	n/a	–40 –180 a –5
CXP (CXP = RO2 - ST3)	n/a	9 0 a 55	27 0 a 55	n/a	–17 –55 a 0	–12 –55 a 0
IE3	n/a	2 0 a 5	1,5 0 a 5	n/a	–2,500 –5 a 0	–1,2 –5 a 0
(1) fonte de íons Turbo V™ (2) sonda TurboIonSpray® (3) sonda APCI						

Calibração de Íons e Soluções D

Tabela D-1 Ajuste da frequência

Calibração			Otimização da Resolução	
Tipo de varredura	**Frequência**	**Manual/Automática**	**Frequência**	**Manual/Automática**
Q1 e Q3	3 meses a 6 meses	Ambos	3 meses a 6 meses	Ambos

Tabela D-2 Soluções de ajuste sugeridas para o sistema AB SCIEX Triple Quad 3500 LC/MS/MS

Sistema	Positivo	Negativo
Sistema AB SCIEX Triple Quad™ 3500 LC/MS/MS	PPG 1×10^{-5} M PPG (1:10)	NEG PPG 3×10^{-4}

Tabela D-3 Varreduras de Íons Positivos Q1 e Q3 PPG

Massas							
59,0	175,1	500,3	616,5	906,7	1254,9	1545,1	1952,4

Tabela D-4 Varreduras de Íons Negativos Q1 e Q3 PPG

Massas							
45,0	411,2	585,4	933,6	1223,8	1572,1	1863,3	1979,3

Ícones da Barra de Ferramentas E

Para ícones adicionais da barra de ferramentas, consulte o*Guia do Usuário Avançado*.

Tabela E-1 Ícones da Barra de Ferramentas

Ícone	Nome	Descrição
	Novo Subprojeto	Cria um subprojeto. **Subprojects** (Subprojetos) só podem ser criados depois no processo se o projeto foi originalmente criado com subprojetos.
	Copiar Subprojeto	Copia uma pasta de Subprojeto. Subprojetos só podem ser copiados de outro projeto que possui subprojetos existentes. Se as mesmas pastas existirem em ambos os níveis de projeto e subprojeto, então o software usa as pastas de nível do projeto.

Tabela E-2 Ícones de Editor do Método de Aquisição

Ícone	Nome	Descrição
	Espec. de Massas	Mostra a aba **MS** no editor **Acquisition Method** (Método de Aquisição).
	Período	Clique com o botão direito para adicionar um experimento, adicione um **IDA Criteria Level** (Nível de Critério IDA), ou exclua o período.
	Autoamostrador	Abre a aba **Autosampler Properties** (Propriedades do Autoamostrador).
	Bomba da Seringa	Abre a aba **Syringe Pump Properties** (Propriedades da Bomba da Seringa).
	Coluna do Forno	Abre a aba **Column Oven Properties** (Propriedades da Coluna do Forno).
	Válvula	Abre a aba **Valve Properties** (Propriedades da Válvula).
	DAD	Abre **DAD Method Editor** (Editor do Método DAD). Consulte *Gerar Dados DAD na página 97*.
	ADC	Abre a aba **ADC Properties** (Propriedades ADC). Consulte *Mostrar os dados ADC na página 91*.

Tabela E-3 Ícones do Modo de Aquisição

Ícone	Nome	Descrição
	Visão em Espera	Mostra a amostra em espera.
	Instrumento Em espera	Mostra uma estação de instrumento remota.
	Status do Instrumento Remoto	Mostra o status de um instrumento remoto.
	Iniciar a Amostra	Inicia a amostra que está em espera.
	Parar Amostra	Para a amostra que está em espera.
	Abortar Amostra	Aborta a aquisição da amostra no meio do processamento da amostra.
	Interromper Espera	Interrompe a espera antes de concluir o processamento de todas as amostras.
	Pausar Amostra Agora	Insere uma pausa na espera.
	Inserir Pausa antes da(s) Amostra(s) Selecionada(s)	Insere uma pausa antes de uma amostra específica.
	Continuar Amostra	Continua a aquisição da amostra.
	Próximo Período	Começa um novo período.
	Aumentar Período	Aumenta o período atual.
	Próxima Amostra	Interrompe a aquisição da amostra atual e inicia a aquisição da próxima amostra.
	Equilibrar	Seleciona o método a ser usado para equilibrar o dispositivo. Este método deve ser o mesmo método usado com a primeira amostra em espera.
	Em Espera	Coloca o instrumento no modo **Standby** (Em Espera).
	Pronto	Coloca o instrumento no modo **Ready** (Pronto).

Tabela E-3 Ícones do Modo de Aquisição (continuação)

Ícone	Nome	Descrição
T	Reservar o Instrumento para Ajuste	Reserva o espectrômetro de massas para ajuste e calibração.
	Assistente do Método IDA	Inicia o **IDA Method Wizard** (Assistente do Método IDA).
P	Limpar o Modificador	Inicia a limpeza do modificador da bomba do modificador.

Tabela E-4 Ícones de Modo de Ajuste e Calibre

Ícone	Nome	Descrição
	Calibrar a partir do espectro	Abre a opção de diálogo **Mass Calibration Option** (Opção de Calibração de Massa) e usa o espectro ativo para calibrar o espectrômetro de massas.
	Ajuste Manual	Abre o **Manual Tune Editor** (Editor de Ajuste Manual).
	Otimização do composto	Otimiza para um composto usando infusão por FIA.
	Otimização do Instrumento	Verifica o desempenho do instrumento, ajusta a calibração da massa, ou ajusta as configurações do espectrômetro de massas.
	Visão em Espera	Visualiza a amostra em espera.
	Instrumento Em espera	Visualiza um instrumento remoto.
	Status do Instrumento Remoto	Visualiza o status de um instrumento remoto.
T	Reservar o Instrumento para Ajuste	Reserva o instrumento para ajuste e calibração.
	Assistente do Método IDA	Inicia o **IDA Method Wizard** (Assistente do Método IDA).

Tabela E-5 Explorar a Referência Rápida: Cromatogramas e Espectro

Ícone	Nome	Descrição
	Abrir Arquivo de Dados	Abre os arquivos.
	Mostra a Próxima Amostra	Vai para a próxima amostra.
	Mostra a Amostra Anterior	Vai para a amostra anterior.
	Ir Para Amostra	Abre a caixa de diálogo **Select Sample** (Selecionar Amostra).
	Lista de Dados	Visualiza os dados nas tabelas.
	Mostrar TIC	Gera um TIC a partir de um espectro.
	Extrair Usando Diálogo	Extrai os íons selecionando as massas.
	Mostrar Cromatograma do Pico de Base	Gera uma BPC.
	Mostrar Espectro	Gera um espectro a partir de um TIC.
	Copiar Gráfico em nova Janela	Copia o gráfico ativo para uma nova janela.
	Substrato de Referência	Abre a caixa de diálogo **Baseline Substract** (Substrato de Referência).
	Limiar	Ajusta o limiar.
	Filtro de Ruído	Mostra a caixa de diálogo **Noise Filter Options** (Opções do Filtro de Ruído) que pode ser usada para definir a largura mínima de um pico. Sinais abaixo desta largura mínima são registrados como ruído.
	Mostrar ADC	Mostrar os dados ADC.
	Mostrar Informação do Arquivo	Mostra as condições experimentais usadas para coletar os dados.

Tabela E-5 Explorar a Referência Rápida: Cromatogramas e Espectro (continuação)

Ícone	Nome	Descrição
	Adicionar setas	Adiciona setas ao eixo-x do gráfico ativo.
	Remover todas as setas	Remove setas do eixo-x no gráfico ativo.
	Desvio do Gráfico	Compensa por ligeiras diferenças de tempo em que os dados ADC e os dados do espectrômetro de massas são registrados. Isto é útil ao se sobrepor gráficos para comparação.
	Forçar Rótulos no Pico	Rotula todos os picos.
	Expandir Seleção Para	Configura o fator de expansão de uma parte de um gráfico a ser visualizado em maiores detalhes.
	Limpar variações	Retorna a seleção expandida para a visualização normal.
	Configurar Seleção	Define os pontos de início e término para uma seleção. Este recurso fornece a seleção mais precisa possível do que selecionando a região usando o cursor.
	Normalizar para Máximo	Escala um gráfico ao tamanho máximo, de forma que o pico mais intenso é escalado em escala total, seja visível ou não.
	Mostrar Histórico	Mostra um resumo das operações de processamento de dados realizada em um arquivo em particular, como alisamento de pico, subtração, calibração e filtro de ruído.
	Abrir Banco de Dados de Compostos	Abre o banco de dados de compostos.
	Definir Limiar	Ajusta o limiar.
	Mostrar Contorno do Gráfico	Mostra os dados selecionados como gráfico do espectro ou um XIC. Ainda, para dados adquiridos como um DAD, um contorno do gráfico pode mostrar os dados selecionados como um espectro DAD ou um XWC.
	Mostrar TWC do DAD	Gera um TWC do espectro DAD.

Tabela E-5 Explorar a Referência Rápida: Cromatogramas e Espectro (continuação)

Ícone	Nome	Descrição
	Mostrar Espectro DAD	Gera um espectro DAD.
	Extrair Comprimento de onda	Extrai até três variações de comprimento de onda de um espectro DAD para visualizar o XWC.

Tabela E-6 Aba de Integração e Ícones do Assistente de Quantificação

Ícone	Nome	Descrição
	Configurar os parâmetros da linha de base	Utiliza a linha de base selecionada.
	Selecionar Pico	Utiliza o pico selecionado.
	Modo de Integração Manual	Integra os picos de forma manual.
	Mostrar ou Ocultar os Parâmetros	Alterna os parâmetros de descoberta de pico entre mostrar e ocultar.
	Mostrar Gráfico Ativo	Mostra apenas o cromatograma do analito.
	Mostrar Ambos Analito e IS	Mostra o analito e seu cromatograma associado (disponível apenas quando existe um padrão interno associado).
	Usar Visualização Padrão do Gráfico	Retorna para a visualização atual (visualização de todos os dados) (se, por exemplo, o usuário aumentou um cromatograma).

Tabela E-7 Ícones da Tabela de Resultados

Ícone	Nome	Descrição
	Ordenar Seleção Crescente	Ordena a coluna selecionada em valores crescentes.
	Ordenar Seleção Decrescente	Ordenar a coluna selecionada em valores decrescentes.
	Bloquear ou Desbloquear uma Coluna	Bloqueia ou desbloqueia a coluna selecionada. Uma coluna bloqueada não pode ser movida.
	Gráfico Métrico por Seleção	Cria um gráfico métrico a partir da coluna selecionada.
	Mostrar todas as Amostras	Mostra todas as amostras na **Results Table** (Tabela de Resultados).
	Excluir Coluna de Fórmula	Exclui as colunas de fórmula.
	Gerador de Relatório	Abre o software Reporter.

Tabela E-8 Ícone de Referência Rápida: Modo Quantitativo

Ícone	Nome	Descrição
	Adicionar/Remover Amostras	Adiciona ou remove amostras da **Results Table** (Tabela de Resultados).
	Exportar como Texto	Salva a **Results Table** (Tabela de Resultados) como um arquivo de texto.
	Modificar o Método	Abre um arquivo .wiff.
	Revisão do Pico - Painel	Abre o pico em um painel.
	Revisão do Pico - Janela	Abre o pico em uma janela.
	Calibração - Painel	Abre a curva de calibração em um painel.
	Calibração - Janela	Abre a curva de calibração em uma janela.

Tabela E-8 Ícone de Referência Rápida: Modo Quantitativo (continuação)

Ícone	Nome	Descrição
	Mostrar o Primeiro Pico	Mostra o primeiro pico no painel ou janela.
	Mostrar o Último Pico	Mostra o último pico no painel ou janela.
	Mostrar Rastreamento de Ações	Mostra o rastreamento de ações para a **Results Table** (Tabela de Resultados).
	Limpar o Rastreamento de Ações	Limpa o rastreamento de ações para a **Results Table** (Tabela de Resultados).
	Dados Estatísticos	Abre a janela **Statistics** (Estatísticas).
	Gerador de Relatório	Abre o software **Reporter**.

Histórico de Revisão

Revisão	Motivo da Mudança	Data
RUO-IDV-05-1418-A	Primeira versão do documento.	Junho de 2014

Índice

C

D

E

F

G

I

J

L

Q

R

S

T

V

X